

**НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ  
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ  
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»**

**Фізико-математичний факультет**

**Кафедра загальної фізики та фізики твердого тіла**

«На правах рукопису»

УДК 519.633.6

До захисту допущено:

Завідувач кафедри

\_\_\_\_\_ Віталій КОТОВСЬКИЙ

«\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

**Магістерська дисертація**

**на здобуття ступеня магістра**

**за освітньо-науковою програмою «Комп'ютерне моделювання фізичних процесів»**

**зі спеціальності 104 «Фізика та астрономія»**

**на тему: «Чисельний розв'язок рівняння для аксіонів, кандидатів на роль темної матерії»**

Виконав (-ла):

студент (-ка) VI курсу, групи ОФ-81мн

Цимбаленко Ангеліна Андріївна \_\_\_\_\_

Керівник:

Професор, д. ф.-м. н.

Горшков В'ячеслав Миколайович \_\_\_\_\_

Рецензент:

Професор, д. ф.-м. н.

Решетняк Сергій Олександрович \_\_\_\_\_

Засвідчую, що у цій магістерській дисертації немає запозичень з праць інших авторів без відповідних посилань.

Студент (-ка) \_\_\_\_\_

Київ – 2020 року

**АНОТАЦІЯ**  
**ДО ЗВІТУ З МАГІСТЕРСЬКОЇ ДИСЕРТАЦІЇ**  
СТУДЕНТКИ ФМФ, 2 КУРСУ МАГІСТЕРСЬКОГО РІВНЯ ГР. ОФ-81мн  
**Цимбаленко Ангеліни Андріївни**

**На тему:** «Чисельний розв'язок рівняння для аксіонів, кандидатів на роль темної матерії»

**Науковий керівник:** доктор фізико-математичних наук, професор Горшков В'ячеслав Миколайович.

**Актуальність:** при вирішенні багатьох задач нелінійної оптики, фізики плазми, теорії надпровідності, фізики низьких температур, електростатики, математичної імунології, вірусології та багатьох інших задач виникають нелінійні рівняння. Важливим завданням є підвищення ефективності ітераційних методів вирішення нелінійних рівнянь. Запропонований метод чисельного розв'язки дозволяє обчислити стійкий основний стан та нестійкі збуджені стани нелінійного інтегро-диференціального рівняння для аксіонів, що еквівалентне рівнянням Шредінгера-Ньютона. Розроблений незалежний чисельний метод («алгоритм дисипації»), може бути використаний для вирішення системи нелінійних рівнянь. Такий метод орієнтований на сучасну обчислювальну техніку і дозволяє значно розширити спектр задач, що піддаються моделюванню і допускають наближене рішення.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами кафедри:** тема роботи відповідає науковому напрямку кафедри загальної фізики та фізики твердого тіла – «Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави».

**Об'єкт дослідження:** чисельний алгоритм для вирішення нелінійного інтегро-диференційного рівняння для аксіонів, що еквівалентне рівнянням Шредінгера-Ньютона.

**Предмет дослідження:** пошук стійкого основного стану та нестійких збуджених станів нелінійного інтегро-диференціального рівняння для аксіонів, що еквівалентне рівнянням Шредінгера-Ньютона для аксіонів.

**Мета роботи:** розробити алгоритм для чисельного розв'язку нелінійного інтегро-диференціального рівняння яке еквівалентно рівнянням Шредінгера-Ньютона. Знайти основний стан і збуджені стани рівняння.

**Методи дослідження:** основні результати роботи одержано за допомогою комп'ютерних методів дослідження, а саме для розробки алгоритму була використана мова програмування Fortran.

**Відомості про обсяг звіту, кількість ілюстрацій, таблиць, додатків і літературних найменувань за переліком використаних:** звіт складається з переліку умовних позначень, символів, скорочень і термінів, вступу, основної частини (три розділи), висновків, переліку джерел посилення (42 найменування); містить 17 рисунків та 1 таблицю. Повний обсяг звіту – 99 сторінок.

**Мета індивідуального завдання, використані методи та отримані результати:** метою індивідуального завдання було побудувати алгоритм для розв'язку нелінійного інтегро-диференціального рівняння для аксіонів. Одним із головних методів дослідження – комп'ютерне моделювання. У ході виконання завдання експериментальним шляхом було отримано чисельний розв'язок рівняння для заданих параметрів, знайдений основний стан, та декілька збуджених станів.

**Висновок:** в даній дипломній роботі був розроблений та програмно реалізований ефективний "дисипативний" чисельний алгоритм для знаходження основного стану та деяких збуджених станів нелінійного інтегро-диференціального рівняння Шредінгера. Вдалося знайти основний стан для однокомпонентної аксіонної задачі, двокомпонентної аксіонної задачі та для задачі де присутні аксіони та баріонна речовина. "Дисипативний" чисельний алгоритм може бути ефективно використаний при чисельному вирішенні ряду

прикладних задач, які описуються системами нелінійних рівнянь або нелінійними інтегро-диференціальними рівняннями.

***Перелік ключових слів (не більше 20):*** нелінійне рівняння Шпедінгера, густина імовірності, основний стан, потенціал, енергія, хвильова функція, баріонна речовина, бозе-ейнштейн конденсат, аксіон.

**Підпис керівника** \_\_\_\_\_

## SUMMARY

### TO THE REPORT TO MASTER'S DISSERTATION

STUDENT OF FMF, 2 COURSE OF THE MASTER LEVEL, GR. OF-81mn

**Tsymbalenko Angelina**

***On the topic:*** « Numerical solution of the equation for axions, candidates for the role of dark matter»

***Scientific supervisor:*** doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor Vyacheslav Gorshkov.

***Topicality:*** is that when solving many problems of nonlinear optics, plasma physics, superconductivity theory, low temperature physics, electrostatics, mathematical immunology, virology and many other problems, nonlinear equations arise. An important task is to increase the efficiency of iterative methods for solving nonlinear equations. The proposed method of numerical solution allows to calculate the stable ground state and unstable excited states of the nonlinear integro-differential equation for axions, which is equivalent to the Schrödinger-Newton equation. An independent numerical method ("dissipation algorithm") can be used to solve a system of nonlinear equations. This method is focused on modern computer technology and allows to significantly expand the range of problems that can be modeled and allow an approximate solution.

***Relationship of work with scientific programs, plans, themes cathedra:*** The theme of the work corresponds to the scientific direction of the Department of General Physics and Solid State Physics - "Fundamental research on the most important issues of scientific and technical, socio-economic, human potential to ensure Ukraine's competitiveness in the world and sustainable development of society and state."

***Object of research:*** a numerical algorithm for solving a nonlinear integro-differential equation for axions, which is equivalent to the Schrödinger-Newton equation.

**Subject of research:** search for a stable ground state and unstable excited states of a nonlinear integro-differential equation for axions, which is equivalent to the Schrödinger-Newton equation for axions.

**Purpose of work:** develop an algorithm for numerical solution of a nonlinear integro-differential equation which is equivalent to the Schrödinger-Newton equation. Find the ground state and the excited states of the equation.

**Research methods:** the main results of the work were obtained with the help of computer research methods, namely the Fortran programming language was used to develop the algorithm.

**Information about the volume of the report, the number of illustrations, tables, applications and literary names in the list of used ones:** the report consists of a list of symbols, symbols, abbreviations and terms, introduction, main part (three sections), conclusions, list of reference sources (42 items); contains 17 figures and 1 table. The full volume of the report is 99 pages.

**The purpose of the individual task, the methods used and the results obtained:** the purpose of the individual task was to build an algorithm for solving a nonlinear integro-differential equation for axions. One of the main research methods is computer simulation. During the execution of the problem, a numerical solution of the equation for the given parameters was obtained experimentally, the ground state was found, and several excited states.

**Conclusion:** in this thesis, an effective "dissipative" numerical algorithm for finding the ground state and some excited states of the nonlinear integro-differential Schrödinger equation was developed and programmatically implemented. We managed to find the ground state for the one-component axion problem, the two-component axion problem, and for the problem where axions and baryon matter are present. The "dissipative" numerical algorithm can be effectively used in the numerical solution of a number of applied problems, which are described by systems of nonlinear equations or nonlinear integro-differential equations.

**Keyword list (no more than 20):** nonlinear Schrodinger's equation, probability density, ground state, potential, energy, wave function, baryon matter, Bose-Einstein condensate, axion.

**Signature of the head**\_\_\_\_\_

**Національний технічний університет України**  
**«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»**  
**Фізико-математичний факультет**

**Кафедра загальної фізики та фізики твердого тіла**

Рівень вищої освіти – другий (магістерський)

Спеціальність – 104 «Фізика та астрономія»

Освітньо-наукова програма «Комп'ютерне моделювання фізичних процесів»

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри

\_\_\_\_\_ Віталій КОТОВСЬКИЙ

«\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

**ЗАВДАННЯ**  
**на магістерську дисертацію студенту**

**Цимбаленко Ангеліні Андріївні**

1. Тема дисертації «Чисельний розв'язок рівняння для аксіонів, кандидатів на роль темної матерії», науковий керівник дисертації Горшков В'ячеслав Миколайович, професор, д. ф.-м. н., затверджені наказом по університету від «17» березня 2020 р. № 891-с
2. Термін подання студентом дисертації \_\_\_\_\_
3. Об'єкт дослідження: чисельний алгоритм для вирішення вирішення нелінійного інтегро-диференційного рівняння для аксіонів, що еквівалентне рівнянням Шредінгера-Ньютона.
4. Предмет дослідження: пошук стійкого основного стану та нестійких збуджених станів нелінійного інтегро-диференціального рівняння для аксіонів, що еквівалентне рівнянням Шредінгера-Ньютона для аксіонів.
5. Перелік завдань, які потрібно розробити: ознайомитися з методами комп'ютерного моделювання; розробити чисельний алгоритм для задачі на пошук основного стану нелінійного інтегро-диференційного рівняння; запрограмувати на мові Fortran алгоритм для вирішення задачі; дослідити ефективність методу вирішення задачі.



6. Орієнтовний перелік графічного (ілюстративного) матеріалу: «Функції густини ймовірності», «Зміна енергії системи», «Двосторонній метод апроксимації», «Шаблони явної та неявної різнісних схем рівняння теплопровідності», «Кінцево-різнісна сітка»

7. Орієнтовний перелік публікацій: стаття на тему «Темна матерія, її властивості та основні кандидати» до XXI міжнародної науково-практичної інтернет-конференції «Інноваційні вектори розвитку сучасних наукових досліджень» 4 листопада 2019 року.

8. Консультанти розділів дисертації\*

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв

9. Дата видачі завдання 03.09.2019

Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання магістерської дисертації	Строк виконання етапів магістерської дисертації	Примітка
1	Проходження інструктажу з техніки безпеки та охорони праці.	02.09.2019 - 03.09.2019	Виконано
2	Ознайомлення з місцем роботи	04.09.2019 - 06.09.2019	Виконано
3	Вивчення літературних джерел, складання огляду літератури	09.09.2019 - 29.10.2019	Виконано
4	Формування плану публікацій по темі МД або документів по впровадженню (лист з підприємства або подання проекту впровадження в КПП ім. Ігоря Сікорського)	29.10.2019 - 04.11.2019	Виконано
5	Пошук і добір фактичних матеріалів, їх групування	04.11.2019 - 02.12.2019	Виконано
6	Наукові дослідження за темою МД	02.12.2019 - 03.02.2020	Виконано
7	Проходження науково-дослідної практики	03.02.2020 - 17.03.2020	Виконано
8	Складання заліку з науково-дослідної практики	16.03.2020	Виконано
9	Аналіз отриманих результатів	17.03.2020 - 31.03.2020	Виконано
10	Підготовка розділів МД на основі отриманих даних по темі МД	31.03.2020 - 20.04.2020	Виконано
11	Підготовка звіту з МД та	20.04.2020 - 30.04.2020	Виконано

\* Якщо визначені консультанти. Консультантом не може бути зазначено наукового керівника магістерської дисертації.

	оформлення презентацій до захисту		
12	Надання роботи на перевірку керівнику МД	01.05.2020	Виконано
13	Перевірка МД на плагіат	2.05.2020	Виконано
14	Отримання відгуку від керівника МД	10.05.2020	Виконано
15	Подання МД на рецензію	12.05.2020	Виконано
16	Здача МД на нормо-контроль (додержання вимог до оформлення МД)	12.05.2020	Виконано
17	Відсилення анотації МД на сайт кафедри загальної фізики та ФТТ	10.05.2020	Виконано
18	Попередній захист МД	13.05.2020	Виконано
19	Виправлення матеріалу МД згідно з зауваженнями комісії на попередньому захисті	13.05.2020 – 21.05.2020	Виконано
20	Здача МД (друкований та електронний варіанти), Відгуку та Рецензії на кафедру загальної фізики та ФТТ	20.05.2020	Виконано
21	Остаточний захист МД	22.05.2020	Виконано
	Відсилення матеріалів МД у бібліотеку КПІ ім. Ігоря Сікорського та сайт кафедри загальної фізики та ФТТ	22.05.2020	Виконано

Студент

Цимбаленко Ангеліна Андріївна

Науковий керівник

Горшков В'ячеслав Миколайович

## РЕФЕРАТ

**Актуальність теми** полягає в тому, що при вирішенні багатьох задач нелінійної оптики, фізики плазми, теорії надпровідності, фізики низьких температур, електростатики, математичної імунології, вірусології та багатьох інших задач виникають нелінійні рівняння. Важливим завданням є підвищення ефективності ітераційних методів вирішення нелінійних рівнянь. Запропонований метод чисельного розв'язки дозволяє обчислити стійкий основний стан та нестійкі збуджені стани нелінійного інтегро-диференціального рівняння для аксіонів, що еквівалентне рівнянням Шредінгера-Ньютона. Розроблений незалежний чисельний метод («алгоритм дисипації»), може бути використаний для вирішення системи нелінійних рівнянь. Такий метод орієнтований на сучасну обчислювальну техніку і дозволяє значно розширити спектр задач, що піддаються моделюванню і допускають наближене рішення.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами** тема роботи відповідає науковому напрямку кафедри загальної фізики та фізики твердого тіла – «Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави».

**Об'єкт дослідження** чисельний алгоритм для вирішення нелінійного інтегро-диференційного рівняння для аксіонів, що еквівалентне рівнянням Шредінгера-Ньютона.

**Предмет дослідження** пошук стійкого основного стану та нестійких збуджених станів нелінійного інтегро-диференціального рівняння для аксіонів, що еквівалентне рівнянням Шредінгера-Ньютона для аксіонів.

**Мета роботи** розробити алгоритм для чисельного розв'язку нелінійного інтегро-диференціального рівняння яке еквівалентно рівнянням Шредінгера-Ньютона. Знайти основний стан і збуджені стани рівняння.

**Методи дослідження** основні результати роботи одержано за допомогою комп'ютерних методів дослідження, а саме для розробки алгоритму була використана мова програмування Fortran.

**Задачі дослідження** Ознайомитися з методами комп'ютерного моделювання, розробити чисельний алгоритм для задачі на пошук основного стану нелінійного інтегро-диференційного рівняння, запрограмувати на мові Fortran алгоритм для вирішення задачі, дослідити ефективність методу вирішення задачі.

**Наукова новизна одержаних результатів** за допомогою розробленого алгоритму можна чисельно вирішувати нелінійні інтегро-диференційні рівняння та системи нелінійних рівнянь. Було знайдено основний стан для нелінійних рівнянь, що описують аксіони.

**Практичне значення одержаних результатів** отримані в магістерській роботі результати важливі для вивчення багатьох актуальних задач, що містять нелінійні процеси.

**Публікації** стаття на тему «Темна матерія, її властивості та основні кандидати» до XXI міжнародної науково-практичної інтернет-конференції «Інноваційні вектори розвитку сучасних наукових досліджень» 4 листопада 2019 року.

**Ключові слова** нелінійне рівняння Шпедінгера, густина імовірності, основний стан, потенціал, енергія, хвильова функція, баріонна речовина, бозе-ейнштейн конденсат, аксіон.

**В роботі наведено:** використаної літератури - 42, сторінок: - 119, рисунків - 17, таблиць – 1.

## ABSTRACT

**Actuality of theme** is that when solving many problems of nonlinear optics, plasma physics, superconductivity theory, low temperature physics, electrostatics, mathematical immunology, virology and many other problems, nonlinear equations arise. An important task is to increase the efficiency of iterative methods for solving nonlinear equations. The proposed method of numerical solution allows to calculate the stable ground state and unstable excited states of the nonlinear integro-differential equation for axions, which is equivalent to the Schrödinger-Newton equation. An independent numerical method ("dissipation algorithm") can be used to solve a system of nonlinear equations. This method is focused on modern computer technology and allows to significantly expand the range of problems that can be modeled and allow an approximate solution.

**Relationship of work with scientific programs, plans, themes** theme of the work corresponds to the scientific direction of the Department of General Physics and Solid State Physics - "Fundamental research on the most important issues of scientific and technical, socio-economic, human potential to ensure Ukraine's competitiveness in the world and sustainable development of society and state."

**Object of research** a numerical algorithm for solving a nonlinear integro-differential equation for axions, which is equivalent to the Schrödinger-Newton equation.

**Subject of research** search for a stable ground state and unstable excited states of a nonlinear integro-differential equation for axions, which is equivalent to the Schrödinger-Newton equation for axions.

**Purpose of work** develop an algorithm for numerical solution of a nonlinear integro-differential equation which is equivalent to the Schrödinger-Newton equation. Find the ground state and the excited states of the equation.

**Research methods** develop an algorithm for numerical solution of a nonlinear integro-differential equation which is equivalent to the Schrödinger-Newton equation. Find the ground state and the excited states of the equation.

**Tasks of research** get acquainted with the methods of computer modeling, develop a numerical algorithm for the problem of finding the ground state of a nonlinear integro-differential equation, program in Fortran algorithm to solve the problem, investigate the effectiveness of the method of solving the problem.

**Scientific novelty of the results** with the help of the developed algorithm it is possible to numerically solve nonlinear integro-differential equations and systems of nonlinear equations. The ground state for nonlinear equations describing axions was found. The mass of axions is estimated, the energy of the ground state and the dependence of the probability density on the radius of the axion cloud are determined.

**The practical significance of the results** the results obtained in the master's thesis are important for the study of many relevant problems involving nonlinear processes.

**Publications** an article on the topic "Dark matter, its properties and main candidates" was published for the XXI International Scientific and Practical Internet Conference "Innovative Vectors for the Development of Modern Research" November 4, 2019.

**Keywords** nonlinear Schrodinger's equation, probability density, ground state, potential, energy, wave function, baryon matter, Bose-Einstein condensate, axion.

**The article contains:** used literature - 42, pages: - 119, pictures - 17, tables – 1.

## ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СИМВОЛІВ, СКОРОЧЕНЬ І ТЕРМІНІВ.....	17
ВСТУП.....	18
РОЗДІЛ 1. ТЕМНА МАТЕРІЯ У ВСЕСВІТІ .....	21
1.1. ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ .....	21
1.2. СВДОЦТВА ІСНУВАННЯ ТЕМНОЇ МАТЕРІЇ .....	23
1.2.1. Галактичні ротаційні .....	23
1.2.2. Динаміка скупчень галактик.....	25
1.2.3. Космологічні докази.....	27
1.3. КАНДИДАТИ НА РОЛЬ ТЕМНОЇ МАТЕРІЇ .....	30
1.3.1. Баріонна темна матерія .....	30
1.3.2. Небаріонна темна матерія .....	31
1.3.3. Модифіковані теорії (космологічна стала, MOND-теорія, що залежить від часу гравітаційна стала).....	41
1.4 АКСІОНИ. ЕКСПЕРИМЕНТИ ПО ЇХ РЕЄСТРАЦІЇ .....	43
1.4.1 Влістивості аксіонів і їх роль у моделях темної матерії .....	43
1.4.2. Способи детектування аксіонів і аксіоно-подібних частинок .....	48
1.4.3 ADMX експеримент [17],[18] .....	51
1.4.4. CERN Axion Solar Telescope (CAST) [19, 20, 21] .....	54
ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 1 .....	58
РОЗДІЛ 2. ЧИСЕЛЬНЕ РІШЕННЯ ДИФЕРЕНЦІЙНИХ РІВНЯНЬ МЕТОДОМ КІНЦЕВИХ РІЗНИЦЬ .....	59
2.1. ЧИСЕЛЬНЕ РІШЕННЯ ДИФЕРЕНЦІЙНИХ РІВНЯНЬ ІЗ ЧАСТИННИМИ ПОХІДНИМИ .....	59
2.2. ПОНЯТТЯ ПРО МЕТОД КІНЦЕВИХ РІЗНИЦЬ. ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДУ КІНЦЕВИХ РІЗНИЦЬ ДО ВИРІШЕННЯ РІВНЯНЬ ПАРАБОЛІЧНОГО ТИПУ .....	61
2.2.1. Апроксимація граничних умов, що містять похідні.....	66
2.3. РІШЕННЯ РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА, ЯКЕ ЗАЛЕЖИТЬ ВІД ЧАСУ.....	74
2.3. МЕТОД КРАНКА-НІКОЛСОНА .....	75
2.4. ПРОБЛЕМА НЕФІЗИЧНОГО ВІДОБРАЖЕННЯ.....	77
2.5. ЕВОЛЮЦІЙНІ ЗАДАЧІ, НЕЛІНІЙНІ ПО ХВИЛЬОВІЙ ФУНКЦІЇ .....	79
2.6. МЕТОД РОЗЩЕПЛЕННЯ .....	81
ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 2.....	84
РОЗДІЛ 3. ЧИСЕЛЬНИЙ РОЗВ'ЯЗОК РІВНЯННЯ ДЛЯ АКСІОНІВ .....	85

3.1. ОНОКОМПОНЕНТНИЙ ВИПАДОК .....	85
3.1.1. Нелінійне інтегрально-диференціальне рівняння Шредінгера та його основний стан .....	85
3.1.2. Числовий розв'язок .....	89
3.2. ДВОКОМПОНЕНТНИЙ ВИПАДОК .....	97
3.2.1. Нелінійні інтегрально-диференціальні рівняння для двокомпонентної ДМН .....	98
3.2.2. Завдання власного значення в наближенні середнього поля .....	100
3.2.3. Числовий розв'язок .....	103
3.2.4. Результати чисельного розв'язку .....	105
3.3. РОЗМІР АКСИОНІВ ТЕМНОЇ МАТЕРІЇ В ПРИСУТНОСТІ БАРІОННОЇ РЕЧОВИНИ .....	107
3.3.1. Нелінійне інтегратно-диференціальне рівняння для (ДМН) за наявності баріонної маси .....	107
3.3.3. Числовий розв'язок .....	111
3.3.4. Результати.....	113
ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 3.....	115
ВИСНОВКИ .....	116
ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ .....	117



## ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ, СИМВОЛІВ, СКОРОЧЕНЬ І ТЕРМІНІВ

TM – темна матерія

BEK – бозе-ейнштейн конденсат

MACHO (MAssive Compact Halo Objects) – масивні компанині гало  
об'єкти

SUSY (SUperSYmmetry dark matter) – суперсиметричні теорії

DM (Dark Matter) – темна матерія

GUT (Grand Unified Theory) – теорія Великого Об'єднання

SUGRA (SUperGRAvity) – супергравітація

QCD (Quantum ChromoDynamics) квантова хромодинаміка

QED (Quantum ElectroDynamics) – квантова електродинаміка

OTO (Общая Теория Относительности) – загальна теорія відносності

LSP (Lightest Supersymmetric Particle) – найлегша суперсиметрична  
частинка

MOND (MOfified Newtonian Dynamics) – модифікована ньютонівська  
динаміка

WIMP (Weakly Interacting Massive Particles) – слабо взаємодіючі  
масивні частки

WISP (Weakly Interacting Slim Particles) – слабо взаємодіючі легкі частки

MF (Mean Field approach) – наближення середнього поля

DP (Dissipative Protocol) – дисипативним протоколом

DMH (Dark Matter Halo) – гало темної матерії

ULA (Ultra Light Axion) – ультралегкі аксіони

UHA (Ultra Hard Axion) – ультраважкі аксіони

HA (Hard Axion) – важкі аксіони

LA (Light Axion) – легкі аксіони

## ВСТУП

Вміст і властивості темної матерії (ТМ) – одна з найактуальніших проблем сучасної фізики. Темна матерія – це гіпотетична форма матерії, яка не випускає ніякого електромагнітного випромінювання, що ускладнює її спостереження і пошук доказів її існування. Частинки ТМ мають невелику швидкість, тому затримуються в галактиках. Вони взаємодіють між собою настільки слабо, що відчувається тільки гравітаційне поле цієї матерії, в іншому полі вона себе ніяк не проявляє. Згідно з даними Planck 2018, маса темної матерії більш ніж в п'ять разів перевищує масу баріонної матерії у видимому Всесвіті [1]. Зокрема, очікується, що ТМ утворює величезне гало навколо спіральних галактик [2-3].

Існують різні теоретичні моделі, що описують ТМ. Обмежимося моделями, які передбачають те, що ТМ є бозе-ейнштейнівським конденсатом (БЕК) надлегких аксіонів [4-5]. Конденсат Бозе-Ейнштейна - це такий стан квантових частинок, в якому всі вони займають найнижчий енергетичний рівень, тобто мають мінімальну енергію. У лабораторії бозе-конденсат можна утворити при низьких температурах із звичайних атомів. Така речовина демонструє унікальні властивості, такі як надтекучість - здатність речовини протікати через вузькі щілини і капіляри без тертя. Легка темна матерія в галактиці має маленьку швидкість і гігантську концентрацію. Якби вона перебувала в таких же умовах, як речовина в лабораторії, то вона давно утворила би бозе-конденсат, але для цього частинки темної матерії повинні взаємодіяти одна з одною не тільки гравітаційно.

При наближеному описі великих квантовомеханічних систем виникають рівняння, нелінійні по хвильовій функції, такі як рівняння Хартрі-Фока або рівняння Гросса-Пітаєвського, що описує динаміку конденсату Бозе-Ейнштейна. На відміну від стаціонарних задач і задач молекулярної динаміки, для чисельного розрахунку нестаціонарних процесів немає стандартних програмних комплексів, і програми зазвичай або створюються під конкретну

задачу, або їх доводиться істотно модифікувати при застосуванні до нової проблеми.

Цифровий комп'ютер не може вирішувати диференціальні рівняння безпосередньо, тому необхідно перетворити їх в алгебраїчні, точніше, звести задачу до вирішення системи лінійних рівнянь. Найпростішим і найбільш "прозорим" методом такого розв'язку є використання явних та неявних різнісних схем [6-7]. Головною їх перевагою є те, що вони призводять до систем лінійних рівнянь з сильно розрідженою (стрічкової) матрицею, які можуть бути вирішені на комп'ютері досить швидко, а мінусом - складність коректного опису диференціальних операторів нетривіального виду і граничних умов.

В дипломній роботі була використана саме неявна різнісна схема. Неявні схеми мають ту перевагу перед явними, що вони з вимоги стійкості не накладають жорстких обмежень на співвідношення між величинами кроків різнісної сітки по часовій та просторовій змінній. Багато фахівців вважають неявні методи більш потужним і універсальним інструментом для вирішення завдань моделювання технічних систем. Неявні методи краще пристосовані для вирішення систем диференціальних і алгебраїчних рівнянь, до того ж вони більш стійкі. В результаті, не дивлячись на великі витрати машинного часу на кожному кроці інтегрування, пов'язані з необхідністю вирішення СЛАР, загальні витрати можуть бути значно менші за рахунок збільшення кроку інтегрування і зменшення загальної кількості кроків.

Особливістю нестационарної задачі є необхідність послідовного простежування проміжних попередніх станів тіла для правильного розрахунку поточного стану, тобто розгляд історії процесу, в той час як для стаціонарного процесу поняття історії не існує, так як кожне стан може бути розрахований незалежно від попередніх.

Припускається, що ТМ в деяких спіральних галактиках можна описати як основний стан надлегких самогравітуючих аксіонів. Метою дипломної роботи є розробити алгоритм для чисельного розв'язку нелінійного інтегро-

диференціального рівняння яке еквівалентно рівнянням Шредінгера-Ньютона для пошук основного стану таких частинок і оцінити масу аксіонів.

*Актуальність роботи* полягає в тому, що при вирішенні багатьох задач нелінійної оптики, фізики плазми, теорії надпровідності, фізики низьких температур, електростатики, математичної імунології, вірусології та багатьох інших задач виникають нелінійні рівняння. Важливим завданням є підвищення ефективності ітераційних методів вирішення нелінійних рівнянь. Запропонований метод чисельного розв'язки дозволяє обчислити стійкий основний стан та нестійкі збуджені стани нелінійного інтегро-диференціального рівняння для аксіонів, що еквівалентне рівнянням Шредінгера-Ньютона[8-10]. Розроблений незалежний чисельний метод («алгоритм дисипації»), може бути використаний для вирішення системи нелінійних рівнянь. Такий метод орієнтований на сучасну обчислювальну техніку і дозволяє значно розширити спектр задач, що піддаються моделюванню і допускають наближене рішення.

## РОЗДІЛ 1. ТЕМНА МАТЕРІЯ У ВСЕСВІТІ

Є вагомі аргументи на користь того, що велика частина речовини у Всесвіті нічого не випромінює і тому невидима. Наявність такої невидимої матерії можна виявити її гравітаційною взаємодією з випромінюючою речовиною. Дослідження скупчень галактик та обертальних кривих галактик свідчать про існування цієї так званої темної речовини. Тому за визначенням темна матерія – це матерія, яка не взаємодіє з електромагнітним випромінюванням, тобто не випромінює його і не поглинає.

### 1.1. Загальні відомості

Перше виявлення невидимої матерії датується останніми століттями. У 1844 році Фрідріх Бессель писав у листі до Карла Гауса, що неможливість пояснення нерівномірного руху Сіріуса може бути наслідком його гравітаційної взаємодії з деяким сусіднім тілом, останнє в цьому випадку повинно мати досить велику масу. За часів Бесселя такий темний супутник Сіріуса був невидимий; його виявили лише оптично в 1862 р. Він був білим карликом, званий Сиріус-Б, тоді як самого Сіріуса назвали Сіріус-А[11].

Густину речовини у Всесвіті  $\rho$  можна оцінити з спостережень за рухом окремих галактик. Зазвичай  $\rho$  задається в одиницях так званої критичної густини  $\rho_c$ :

$$\rho_c = \frac{3H^2}{8\pi G}, \quad (1.1)$$

У цій формулі  $G$  - гравітаційна константа,  $H$  - константа Хаббла, яка відома з низькою точністю ( $0.4 < H < 1$ ) і також, ймовірно, залежить від часу:

$$V = HR, \quad (1.2)$$

формула Хаббла для швидкості розширення Всесвіту,  $H = 67.4 \pm 0.5$  (км/с)/Мпк.

Коли  $\rho > \rho_c$  Всесвіт закритий, тобто гравітаційна взаємодія є досить сильною, щоб розширення Всесвіту було замінено стисненням.

Таким чином, критична щільність визначається наступним:

$$\rho_c = 1.88 \cdot 10^{-26} h^2 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3} = 1.05 \cdot 10^{-5} h^2 \frac{\text{Гев}}{\text{см}^3}, \quad (1.3)$$

де  $h = H/100$  (км/с)/Мпк) – безрозмірна константа Хаббла.

Космологічна щільність  $\Omega = \rho/\rho_c$ , визначена на основі динаміки галактичних кластерів і надкластерів, становить  $0.1 < \Omega < 0.3$ .

Спостерігаючи природу збільшення регіонів Всесвіту у великих масштабах за допомогою інфрачервоного астрономічного супутника IRAS,  $0.25 < \Omega < 2$ .

З іншого боку, оцінка баріонової щільності  $\Omega_b$  за світністю галактик дає значно менше значення:  $\Omega_b < 0.02$ .

Ця непослідовність зазвичай розглядається як вказівка на існування невидимої матерії.

Останнім часом проблемам пошуку темної речовини приділяли велику увагу. Враховуючи всі форми баріонічних речовин, такі як міжпланетний пил, коричневі та білі карлики, нейтронні зірки та чорні діри, виявляється, що для пояснення всіх спостережуваних явищ потрібна значна частка небаріонічної речовини. Це твердження залишається дійсним навіть після врахування поточних даних про так званих об'єктах MACHO (MAssive Compact Halo Objects), виявлених під дією гравітаційних лінз.

## 1.2. Свідоцтва існування темної матерії

### 1.2.1. Галактичні ротаційні

У разі спіральних галактик швидкість обертання окремих зірок навколо центру галактик визначається умовою постійності орбіт.

Порівнюючи відцентрові та гравітаційні сили:

$$\frac{GmM_r}{r^2} = \frac{mv^2}{r}, \quad (1.4)$$

для швидкості обертання ми маємо:

$$v(r) = \sqrt{\frac{GM_r}{r}}, \quad (1.5)$$

де  $M_r$  - вся маса речовини у сфері радіусу  $r$ . У разі досконалої сферичної або циліндричної симетрії вплив маси поза цією сферою взаємно компенсується. У першому наближенні центральну область галактики можна вважати сферичною, тобто,

$$M_r = \bar{\rho} \frac{4}{3} \pi r^3 \Rightarrow v(r) = \sqrt{\frac{4}{3} \pi G \bar{\rho} r^2} \approx r, \quad (1.6)$$

де  $\bar{\rho}$  – середня щільність.

Усередині галактики очікується лінійне збільшення швидкості обертання із збільшенням відстані від центру. У зовнішній області галактики маса  $M_r$  майже постійна, а залежність швидкості від відстані відповідає ймовірності з точковою масою в центрі галактики:

$$v(r) \approx \frac{1}{\sqrt{r}}, \quad (1.7)$$

Швидкість обертання  $v(r)$  визначається, наприклад, шляхом вимірювання доплерівського зсуву в спектрі випромінювання ділянок He-II навколо О-зірок. Поведінка експериментально виміряних обертальних кривих спіральних галактик не відповідає зменшенню  $v(r)$  зі збільшенням радіусу. Вивчення 21-см лінії (перехід надтонкої структури в атом водню), випромінюваної міжзоряною речовиною, призвело до аналогічного результату. Постійність  $v(r)$  при великих значеннях радіусу означає, що маса  $M_r$  також збільшується зі збільшенням радіусу:  $M_r \sim r$ . Це свідчить про наявність невидимої матерії. Зірки рухаються швидше, ніж ви могли очікувати, виходячи з відомої кількості речовини.

Виходячи з цього спостереження, було передбачено існування сферичного ореолу темної матерії, що оточує галактику, і він відповідав за невід'ємну поведінку обертальних кривих. Крім того, сферичний ореол міг би сприяти стабільності форми диска галактики та підтверджувати гіпотезу галактик із сферичних протогалактик. Модельні розрахунки, виконані для Чумацького Шляху, на основі яких були відтворені обертові криві, враховуючи наявність ореолу, вказують на те, що в цьому ореолі повинна знаходитися значна кількість маси. Кульові скупчення, сферичні скупчення зірок, які представляють найдавніші об'єкти в галактиці і які сферично розподілені, також свідчать про існування сферичних ореолів.

Однак недавні дослідження прозорості галактик кидають тінь на цю картину. Розглядаючи ступінь темряви спіральних галактик як функцію кута нахилу, можна зробити висновок, що такі об'єкти прозорі. Якби галактика була абсолютно прозорою, то її повна світність не залежала б від кута, під яким спостерігається ця галактика, оскільки всі зірки були б видні однаково добре (нехтуючи розміром зірок). З іншого боку, постійна яскравість поверхні означає, що галактика не прозора. При цьому спостерігач завжди бачить лише



зовнішні зірки, тобто завжди однакове число на одиницю поверхні, незалежно від кута зору. Експериментально було встановлено, що яскравість поверхні залишається в середньому постійною, що може свідчити про майже повну непрозорість спіральних галактик. У цьому випадку використання оптичних методів для визначення масової щільності Всесвіту не зовсім точне. Більш детальний аналіз результатів вимірювань призвів до висновку молекулярних хмар як абсорбуючих матеріалів (близько 50 пс. в діаметрі і близько 20 К в температурі). Згідно із законом переміщення Віна, такі хмари повинні випромінюватись у районі субміліметра. Цей результат міг би пояснити поведінку обертальних кривих, не припускаючи наявності додаткової екзотичної темної речовини.

Докази існування темної речовини знайдені також у еліптичних галактиках. Газоподібні ореоли з температурою близько 107 К були виявлені шляхом їх поглинання за допомогою рентгенівських променів. Швидкість цих молекул газу більша за швидкість розширення:

$$v_r = \left( \frac{2GM}{r} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (1.8)$$

припускаючи, що їхні маси відповідають світності. Для еліптичних галактик відношення маси до світності приблизно на два порядки більше, ніж у Сонця, що є типовим прикладом середньої зірки. Таке велике значення зазвичай пов'язане з існуванням темної речовини.

### 1.2.2. Динаміка скупчень галактик

Динаміка скупчень галактик свідчить про існування темної речовини. Коли рух системи, потенційна енергія якої є однорідною координатною функцією, відбувається в обмеженій космічній області, тоді усереднені значення кінетичної та потенційної енергії пов'язані між собою за теоремою віріала. Він може бути використаний для оцінки щільності речовини в скупченнях великої кількості галактик [12].

Якщо потенційна енергія  $U$  є однорідною функцією радіусних векторів  $r_i$  ступеня  $k$ , то  $U$  і кінетична енергія  $\bar{T}$  пов'язані як  $2\bar{T} = k\bar{U}$ . Оскільки  $\bar{T} + \bar{U} = \bar{E} - E$ , то випливає, що:

$$\bar{U} = \frac{2E}{k+2}, \quad \bar{T} = \frac{kE}{k+2}, \quad (1.9)$$

де  $E$  - загальна енергія. Тому для гравітаційної взаємодії ( $U \sim 1/r$ )  $k = -1$ , тому  $2\bar{T} = -\bar{U}$ . Середня кінетична енергія скупчення  $N$  галактик визначається виразом:

$$\bar{T} = N \frac{\langle mv^2 \rangle}{2}. \quad (1.10)$$

Ці  $N$  галактик можуть взаємодіяти між собою парами. Тому існує  $N(N-1)/2$  незалежних пар галактик, загальна середня потенційна енергія яких становить:

$$\bar{U} = \frac{GN(N-1)\bar{m}^2}{2r}, \quad (1.11)$$

для  $N\bar{m} = M$  і  $(N-1) \approx N$  динамічна маса буде  $M \approx \frac{2\langle r \rangle \langle v^2 \rangle}{G}$ .

Вимірювання середньої відстані  $\langle r \rangle$  і середньої швидкості  $\langle v \rangle$  дають значення динамічної маси, що приблизно на два порядки більше, ніж маса, отримана в результаті аналізу світності галактик. Цей факт можна інтерпретувати як ще одне свідчення на користь існування темної матерії.

Цей аргумент також має свої слабкі сторони. Рівняння віріала справедливе лише тоді, коли усереднено протягом тривалого періоду часу, коли закриті системи перебувають у рівновазі. Однак вимірювання галактичних скупчень - це щось на зразок знімків. Причому скупчення

галактик не є замкнутими системами, вони взаємопов'язані. Нарешті, не ясно, чи досягли вони стану рівноваги чи ні.

### 1.2.3. Космологічні докази

Дано було визначення критичної щільності  $\rho_c$  вище. Це можна отримати на основі ньютонівської динаміки шляхом обчислення критичної швидкості розширення сферичної галактики:

$$E = T + U = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{Gm}{r}\rho\frac{4}{3}\pi r^3 = 0. \quad (1.12)$$

Співвідношення для  $\rho_c$  випливає з виразу для  $E$ , припускаючи, що  $H = r'/r = v/r$ .

Опис динаміки Всесвіту базується на польових рівняннях Ейнштейна (Загальна теорія відносності). Вони дещо спрощують припущення про однорідність та ізотропію простору. У метриці Робертсона-Уолкера нескінченно малий лінійний елемент задається так:

$$ds^2 = c^2 dt^2 - R^2(t) \left( \frac{dr^2}{1 - kr^2} + r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta d\varphi^2) \right), \quad (1.13)$$

де  $r, \theta, \varphi$  - сферичні координати точки. Ступені свободи цієї метрики включаються в параметр  $k$  і масштабний коефіцієнт  $R$ . Значення  $k$  приймає лише дискретні значення (якщо не враховувати фрактальну геометрію) і не залежить від часу. Значення  $k$  є характеристикою моделі Всесвіту ( $k = -1$  - гіперболічна метрика (відкритий Всесвіт),  $k = 0$  - евклідова метрика (плоский Всесвіт),  $k = +1$  - сферична метрика (замкнений Всесвіт)).

Динаміка Всесвіту повністю визначається масштабною функцією  $R(t)$  (відстань між двома сусідніми точками простору з координатами  $r, \theta, \varphi$  змінюється з часом як  $R(t)$ ). У випадку сферичної метрики  $R(t)$  - радіус

Всесвіту. Ця функція масштабу задовольняє рівняння Ейнштейна-Фрідмана-Лемметра:

$$\left[ \frac{R'(t)}{R(t)} \right]^2 = \frac{8\pi G}{3} \rho(t) - \frac{kc^2}{R^2(t)} + \frac{\Lambda c^2}{3}, \quad (1.14)$$

$$\frac{R''(t)}{R(t)} = -\frac{4\pi G}{3} \left( \rho(t) + \frac{3}{c^2} p(t) \right) + \frac{\Lambda c^2}{3}, \quad (1.15)$$

де  $p(t)$  - загальний тиск, а  $\Lambda$  - космологічна константа, що інтерпретується як щільність енергії вакууму в межах сучасних теорій квантового поля. Далі припустимо, що  $\Lambda = 0$ , як це часто робиться для пояснення досвідчених фактів без введення темної матерії. Коефіцієнт  $R'_0/R_0$  визначає постійну Хаббла  $H_0$ , де сучасні значення відповідних значень позначаються індексом "0". З наведених формул випливає, що для параметра кривизни  $k = 0$  теперішня критична щільність Всесвіту задається виразом, межа якого є межею між відкритим і закритим Всесвітом (це значення, здається, відокремлює сценарій, у якому Всесвіт назавжди розширюється від цього сценарію, коли Всесвіт руйнується в кінці тимчасової фази розширення):

$$\rho_{c0} = \frac{3H_0^2}{8\pi G}. \quad (1.16)$$

Параметр щільності часто використовується:

$$\Omega_0 = \frac{\rho_0}{\rho_{c0}} = \frac{8\pi G \rho_0}{3H_0^2} = 1 + \frac{kc^2}{R_0^2 H_0^2} = 2q_0, \quad (1.17)$$

де  $q_0$  - параметр гальмування:

$$q(t) = -\frac{R(t)R''(t)}{(R'(t))^2}, \quad (1.18)$$

Таким чином можливі три випадки:

$\Omega_0 < 1$  – Всесвіт відкритий,

$\Omega_0 = 1$  – Всесвіт плоский,

$\Omega_0 > 1$  – Всесвіт замкнений.

Вимірювання параметра щільності дало оцінку  $\Omega_0 \approx 0.2$ , на основі якої слід було очікувати відкритого характеру Всесвіту. Однак ряд теоретичних концепцій важко узгодити з відкритим всесвітом, наприклад, так звана "площинна" проблема та генезис галактик.

### **Проблема площинності**

Як бачимо, щільність Всесвіту дуже близька до критичної. З рівнянь Ейнштейна-Фрідмана-Леметра випливає (при  $\Lambda = 0$ ):

$$\frac{R'^2(t)}{kc^2} = \frac{8\pi G\rho(t)R^2(t)}{3kc^2} - 1. \quad (1.19)$$

Оскільки щільність  $\rho(t)$  пропорційна  $1/R^3(t)$ , то виразом для  $\Omega_0$  ( $k \neq 0$ ) маємо:

$$\Omega(t) = 1 + \frac{1}{\left(\frac{a}{kR(t)}\right) - 1}, \quad a = \frac{8\pi G}{3c^2}. \quad (1.20)$$

Таким чином, значення  $\Omega \approx 1$  дуже нестабільне. Будь-яке відхилення від повністю плоского випадку сильно збільшується по мірі розширення Всесвіту. Це означає, що під час первісного ядерного синтезу Всесвіт повинен був бути набагато більш рівним, ніж зараз.

Одне з можливих рішень цієї проблеми подано в інфляційних моделях. Передбачається, що розширення раннього Всесвіту (в інтервалі між  $10^{-34}$ с і  $10^{-31}$ с після Великого вибуху) відбулося експоненціально у фазі інфляції. У цих моделях параметр щільності зазвичай не залежить від часу ( $\Omega = 1$ ). Однак є теоретичні вказівки, що значення параметра щільності в діапазоні  $0.01 < \Omega_0 < 2$  також узгоджується з моделлю інфляції.

### **1.3. Кандидати на роль темної матерії**

#### **1.3.1. Баріонна темна матерія**

Найбільш очевидним кандидатом на роль темної матерії може бути звичайна, не випромінююча, баріонова матерія. Однією з можливостей може бути реалізація міжзоряного або міжгалактичного газу. Однак у цьому випадку характерні лінії випромінювання або лінії поглинання, які не виявляються.

Іншим кандидатом можуть бути коричневі карлики - космічні тіла, маси яких значно менші за масу Сонця ( $M < 0.08M_{\text{сонця}}$ ). Гравітаційного тиску всередині цих об'єктів недостатньо для створення температур, при яких починається процес злиття протонів у гелій. Через брак ядерного синтезу випромінювання коричневих карликів дуже слабке, якщо не враховувати випромінювання тих, що знаходяться на ранній стадії їх розвитку. Планети також можуть бути частиною цієї групи. Однак через відсутність знань про походження зірок і планет, а також обмеження фотометричного виявлення небесних тіл на відстані декількох світлових років оцінити кількість таких об'єктів особливо складно.

Дуже компактні об'єкти, що знаходяться на завершальній стадії розвитку зірки (білі карлики, нейтронні зірки та чорні діри), також можуть бути частиною темної матерії. Оскільки майже кожна зірка досягає однієї з цих трьох завершальних стадій протягом свого життя, значна частина більш ранніх і важчих зірок повинна бути присутня у випромінювальній формі у вигляді білих карликів, нейтронних зірок або чорних дір. Частина цієї речовини повертається в міжзоряний простір надновими або іншими спалахами і бере

участь у утворенні нових зірок. Однак зірки з масою  $M < 0.09M_{\text{сонця}}$  не повинні враховуватися, оскільки їх тривалість життя довша за вік Всесвіту, і вони ще не досягли завершальних етапів свого розвитку.

Верхні межі щодо можливої щільності баріонової речовини у Всесвіті можна отримати з початкових даних ядерного синтезу, які почалися приблизно через 3 хвилини після Великого вибуху. Особливо важливим є вимірювання поточної поширеності дейтерію -  $(D/H)_0 \approx 10^{-5}$ , оскільки утворення дейтерію відбувалося переважно під час початкового синтезу ядер. Хоча дейтерій також з'явився пізніше як проміжне з'єднання реакцій синтезу, загальний вміст дейтерію значно не збільшився. Аналіз процесів, що відбуваються на стадії раннього синтезу ядер, дає верхню границю -  $\Omega_{o,b} < 0.1 - 0.2$  для щільності можливої баріонової речовини у Всесвіті. При цьому враховується вся матерія, що утворилася під час ядерного синтезу в ранньому Всесвіті. Це значення добре узгоджується з оцінками, отриманими з огляду на характер обертання галактики.

З іншого боку, зараз цілком зрозуміло, що баріонова матерія сама по собі не здатна задовольнити умову  $\Omega = 1$ , що випливає з інфляційних моделей. Крім того, проблема галактик залишається невирішеною. Все це призводить до необхідності існування небаріонової темної речовини, особливо в тому випадку, коли потрібно задовольнити умови  $\Omega = 1$  при нульовій космологічній константі.

### 1.3.2. Небаріонна темна матерія

Теоретичні моделі пропонують великий вибір можливих кандидатів на роль небаріонової темної речовини, включаючи: легкі та важкі нейтрино, надсиметричні частинки моделей SUSY, аксіони, косміони, магнітні монополі, частинки Хіггса - вони узагальнені в таблиці. У таблиці також містяться теорії, що пояснюють експериментальні дані без введення темної речовини (залежна від часу гравітаційна константа в неньютонівській гравітації та космологічна константа). Позначення: DM - це темна матерія, GUT - теорія Великого

Об'єднання, SUSY - це суперсиметричні теорії, SUGRA - супергравітація, QCD - квантова хромодинаміка, QED - квантова електродинаміка, ОТО - загальна теорія відносності. Термін WIMP (слабо взаємодіючі тверді частинки) використовується для позначення частинок масою більше кількох  $\text{GeV}/c^2$ , які беруть участь лише у слабкій взаємодії. З новими вимірюваннями COBE та червоним зміщенням реліктового випромінювання за допомогою IRAS нещодавно було проведено дослідження розподілу галактик на великі відстані та виникнення масштабних структур у нашій галактиці. На основі аналізу різних мод в утворенні структур було зроблено висновок, що існує лише одна задовільна модель Всесвіту з  $\Omega = 1$ , в якій змішана темна речовина: 70% існує у вигляді холодної темної речовини та 30% у вигляді гарячої темної речовини, остання складається з двох безмасових нейтрино та одного нейтрино масою  $7,2 \pm 2 \text{ eV}$ . Це означає відродження раніше відкинutoї моделі змішаної темної матерії.

### **Легкі нейтрино**

На відміну від усіх інших кандидатів на роль темної речовини, нейтрино має очевидну перевагу: вони, як відомо, існують. Вони добре відомі своїм розповсюдженням у Всесвіті. Для того, щоб нейтрино було кандидатами на роль темної матерії, вони, безумовно, повинні мати масу. Для досягнення критичної щільності Всесвіту нейтринні маси повинні лежати в області декількох  $\text{GeV}/c^2$  або в інтервалі від 10 до 100  $\text{eV}/c^2$ .

В якості таких кандидатів можливі також важкі нейтрино, оскільки космологічно значимий добуток  $m_\nu e^{-m_\nu/kT_f}$  стає малим і для великих мас. Тут  $T_f$  температура, при якій важкі нейтрино перестають знаходитися в тепловій рівновазі. Цей множник Больцмана дає перевагу нейтрино по масі по відношенню до поширеності нейтрино без маси.



Таблиця 1.1 – кандидати на роль ТМ

Частинка	Маса	Теорія	Прояв
$G(R)$	—	Неньютонівська гравітація	Прозора DM на великих масштабах
$\Lambda$ (косм. стала)	—	ОТО	$\Omega = 1$ без DM
Аксіон, майорон, голдстоун, бозон	$10^{-5}$ eV	QCD; порушення симетрії Печеї-Квіна	Холодна DM
Звичайне нейтрино	10-100 eV	GUT	Гаряча DM
Легке хигсино, фотіно, гравітіно, аксіоно, снейтрино	10-100 eV	SYSY/DM	
Парафотон	20-400 eV	Модифікована QED	Гаряча, тепла DM
Праві нейтрино	500 eV	Суперслабка взаємодія	Тепла DM
Гравітіно	500 eV	SYSY/SUGRA	Тепла DM
Фотіно, гравітіно, аксіон, дзеркальні частинки, нейтрино Сімпсона	keV	SYSY/SUGRA	Тепла/холодна DM
Тіньова матерія	MeV	SYSY/SUGRA	Гаряча/холодна DM

Фотіно, снейтрино, хігсіно, глюіно, важке нейтрино	MeV	SUSY/SUGRA	Холодна DM
Преон	20-200 TeV	Зіставні моделі	Холодна DM
Монополі	$10^{16}$ GeV	GUT	Холодна DM
Піргон, максимон, полюс Перрі	$10^{19}$ GeV	Теорії вищих розмірностей	Холодна DM
Суперструни	$10^{19}$ GeV	SUSY/SUGRA	Холодна DM
Кваркові самородки	$10^{15}$ г	QCD/ GUT	Холодна DM
Космічні струни	$10^8 - 10^{10} M_{\text{сонця}}$	GUT	Формування галактик
Косміон	4-11 GeV	Проблема нейтрино	Формування потоків нейтрино на Сонці
Чорні діри	$10^{15} - 10^{30}$ г	ОТО	Холодна DM

Для кожного типу нейтрино у Всесвіті щільність нейтрино пов'язана з щільністю фотона відношенням  $n_\nu = (3/11)n_\gamma$ . Строго кажучи, цей вираз справедливий лише для легких мажоранських нейтрино (для нейтраносів Дірака за певних обставин потрібно ввести ще один статистичний коефіцієнт, рівний 2). Щільність фотона можна визначити на основі випромінювання фонового релікту 3 K і досягає  $n_\gamma \approx 400 \text{ см}^{-3}$ .

Виявляється, щільність маси нейтрино близька до критичної, якщо виконується умова:

$$\sum_v \frac{g_v}{2} m_v \approx 100 \text{ eV} \cdot \text{с}^{-2} \frac{\rho_v}{\rho_c} H_0^2, \quad (1.21)$$

де  $g_v$  - статистичний коефіцієнт, який враховує кількість різних спіральних станів для кожного типу нейтрино. Для мажоранівських нейтронів цей коефіцієнт дорівнює 2. Для нейтрино Дірака він повинен дорівнювати 4. Однак зазвичай вважають, що правильні компоненти залишили стан теплової рівноваги набагато раніше, тому можна також припустити, що  $g_v = 2$  і для нейтрино Дірака.

Оскільки щільність нейтрино є тим же порядком, що і щільність фотона, в нейтронах приблизно в  $10^9$  разів більше, ніж у баріонів, тому навіть невелика маса нейтрино могла визначити динаміку Всесвіту. Для досягнення  $\Omega = \frac{\rho_v}{\rho_c} = 1$  необхідні маси нейтрино  $m_v c^2 \approx 15 - 65 \text{ eV}/N_v$ , де  $N_v$  - кількість типів легких нейтрино. Експериментальні верхні межі для мас трьох відомих типів нейтрино:

$$\begin{aligned} m(v_e) &< 7.2 \text{ eV}/c^2 \\ m(v_\mu) &< 250 \text{ кеВ}/c^2, \\ m(v_\tau) &< 31 \text{ МеВ}/c^2. \end{aligned}$$

Таким чином, електронне нейтрино практично усувається як кандидат домінуючої фракції темної речовини. Експериментальні дані для двох інших типів нейтрино не настільки критичні, тому мюонні та тау нейтрино залишаються серед можливих кандидатів. Нейтрино вийшло з стану теплової рівноваги приблизно через 1 с після Великого вибуху при  $10^{10}\text{K}$  (що відповідає енергії 1 МеВ). У цей час вони володіють релятивістською енергією і тому вважаються частинками гарячої темної речовини. Нейтрино також може сприяти процесу утворення галактики. У Всесвіті, де переважають частинки масою  $m_i$ , за критерієм Джинса маса, яка може руйнуватися внаслідок гравітаційних сил, буде такою:

$$M_J \approx 3 \cdot 10^{18} \frac{M_{\odot}}{m_i [\text{eV}]} \quad (1.22)$$

У Всесвіті, де переважають нейтрино, необхідний ступінь стиснення міг би бути встановлений на порівняно пізній стадії, перші структури відповідатимуть надкласерам галактик. Таким чином, скупчення галактик і галактики могли розвиватися шляхом фрагментації цих первинних структур (модель зверху вниз). Однак при такому підході з'являються проблеми, коли розглядається утворення дуже маленьких структур, таких як карликові галактики. Для пояснення утворення досить масивних стискань також слід враховувати принцип Паулі для ферміонів.

### **Важкі нейтрино**

Згідно з даними LEP і SLAC, що стосуються точності вимірювання ширини розпаду  $Z^0$ -бозону, існує лише три типи легких нейтрино, і існування важких нейтрино до значень  $45 \text{ Ge}/c^2$  виключається.

Коли нейтрино з такими великими масами покинули стан теплової рівноваги, вони вже мали нерелятивістську швидкість, саме тому їх називають частинками холодної темної речовини. Наявність важких нейтрино може призвести до раннього гравітаційного стиснення речовини. У цьому випадку спочатку формуватимуться менші структури. Скупчення та надскупчення галактик формувались пізніше шляхом накопичення окремих груп галактик (модель знизу вгору).

### **Аксіони**

Аксони - це гіпотетичні частинки, які виникають із проблеми порушення CP симетрії при сильній взаємодії ( $\Theta$ -проблема). Наявність такої псевдоскалярної частинки викликане порушенням хіральної симетрії Печей-Квін. Маса аксіонів визначається виразом:

$$m_a \cong 0.62 \text{ eV} \frac{10^7 \text{ GeV}}{f_a} \quad (1.23)$$

Взаємодія з ферміонами та калібруючими бозонами описується наступними значеннями констант зв'язку:

$$g_f \approx \frac{m_f}{f_a}, \quad g_b \approx \left(\frac{\alpha}{4\pi}\right) \frac{1}{f_a}. \quad (1.24)$$

Константа розпаду аксіонів  $f_a$  визначається середнім вакуумом поля Хіггса. Оскільки  $f_a$  - вільна константа, яка може приймати будь-які значення між електрослабкою та масштабом Планка, можливі значення аксіононних мас змінюються на 18 порядків. Розрізняють DFSZ-Axions, які взаємодіють безпосередньо з електронами, і так звані адронні аксіони, які взаємодіють з електронами лише в першому порядку теорії збурень. Поширена думка, що аксіони складають холодну темну матерію. Для того, щоб їх щільність не перевищувала критичну, необхідно мати  $f_a < 10^{12}$  ГеВ. Стандартний аксіон Печеї-Куїна з  $f_a \approx 250$  ГеВ вже експериментально виключений, інші варіанти з меншою масою і, відповідно, великими параметрами з'єднання також значно обмежені різними даними, насамперед астрофізичними.

### Суперсиметричні частинки

Більшість суперсиметричних теорій містять одну стійку частинку, яка є новим кандидатом на роль темної матерії. Існування стійкої суперсиметричної частинки впливає із збереження мультиплікативного квантового числа, так званого  $R$ - парності, який приймає значення  $+1$  для звичайних частинок і  $-1$  для їх суперпартнерів. Це закон збереження  $R$ -парності. Відповідно до цього закону, частинки SUSY можуть зберігатися лише парами. Частинки SUSY можуть розкладатися лише на непарну кількість частинок SUSY. Тому найлегша суперсиметрична частинка повинна бути стабільною.

Можна порушити закон збереження  $R$ -парності. Квантове число  $R$  пов'язане з баріонічним числом  $B$  і лептоновим числом  $L$  за співвідношенням  $R = (-1)^{3B+L+2S}$ , де  $S$  - спин частинки. Іншими словами, порушення  $B$  і / або

$L$  може призвести до незбереження  $R$ -парності. Однак існують дуже жорсткі межі для можливості порушення парності  $R$ .

Передбачається, що найлегша суперсиметрична частинка (LSP) не бере участі ні в електромагнітній, ні в сильній взаємодії. Інакше вона поєднувалася б із звичайною речовиною і тепер виглядала б як незвичайна важка частинка. Тоді поширеність такого LSP, нормалізованого до поширення протона, виявиться  $10^{-10}$  для сильної взаємодії, а  $10^{-6}$  для електромагнітного. Ці значення суперечать експериментальній верхній межі:  $\frac{n(LSP)}{n(p)} < 10^{-15} - 10^{-30}$ . Ці оцінки залежать від мас і в цьому випадку відповідають області маси  $1 \text{ GeV} < m_{LSP} c^2 < 10^7 \text{ GeV}$ . Тому було зроблено висновок, що найлегша частинка SUSY, крім гравітаційної взаємодії, бере участь лише у слабкій.

Можливими кандидатами на роль нейтральної найлегшої надсиметричної частинки є фотіно ( $S = 1/2$ ) та зіно ( $S = 1/2$ ), які зазвичай називають гаджіно, а також Хіггсіно ( $S = 1/2$ ), Снейтрино ( $S = 0$ ), і гравітіно ( $S = 3/2$ ). У більшості теорій частинка LSP є лінійною комбінацією вищезазначених частинок SUSY зі спіном  $1/2$ . Маса цього так званого нейтраліно, ймовірно, буде більше  $10 \text{ GeV}/c^2$ . Розгляд частинок SUSY як темної речовини представляє особливий інтерес, оскільки вони з'явилися в зовсім іншому контексті і спеціально не були введені для вирішення проблеми (небаріонової) темної речовини.

### **Косміони**

Косміони вперше були введені для вирішення проблеми сонячних нейтрино. Завдяки високій швидкості ці частинки проходять крізь поверхню зірки з невеликою чи відсутністю перешкод. У центральній області зірки вони стикаються з ядрами. Якщо втрати енергії досить великі, вони більше не можуть покинути цю зірку і накопичуватися в ній з часом. На Сонці захоплені косміони впливають на характер передачі енергії і тим самим сприяють охолодженню центральної області Сонця. Це призвело б до меншої ймовірності утворення нейтрино з  $10^{-8} \text{ В}$  і пояснило б, чому вимірюваний

потік нейтрино на Землі менший, ніж очікувалося. Щоб вирішити цю задачу нейтрино, маса косміонів повинна лежати в межах від 4 до 11  $\text{GeV}/c^2$ , а перетин реакції взаємодії косміонів з речовиною повинен мати значення  $10^{-36} \text{cm}^2$ . Однак експериментальні дані, очевидно, виключають таке рішення проблеми сонячних нейтрино.

### Топологічні дефекти часу і простору

Крім перерахованих вище частинок, топологічні дефекти також можуть сприяти темній речовині. Передбачається, що в ранньому Всесвіті при  $t \approx 10^{-36} \text{с}$ ,  $E \approx 10^{15} \text{GeV}$ ,  $T \approx 10^{28} \text{K}$  відбулося порушення симетрії GUT, що призвело до поділу взаємодій, описаних групами SU (3) і SU (2)  $\times$  U (1). Поле Хігса розмірності 24 набуло певної лінійності, а орієнтація фазових кутів спонтанного розриву симетрії залишалася довільною. Внаслідок цього фазового переходу необхідно було сформувати просторові області з різною орієнтацією. Ці області з часом зростали і врешті-решт вступали в контакт один з одним.

Згідно із сучасними уявленнями, топологічно стійкі точки дефектів формувалися на граничних поверхнях, де зустрічалися ділянки з різною орієнтацією. Вони могли мати розмір від нуля до трьох і складатися з вакууму неперервної симетрії. Після порушення симетрії цей початковий вакуум має дуже високу енергію та щільність речовини.

Найважливішими є точкові дефекти. Вони повинні нести ізольований магнітний заряд, тобто бути магнітними монополями. Їх маса пов'язана з температурою фазового переходу і становить приблизно  $10^{16} \text{GeV}/c^2$ . Поки що, незважаючи на інтенсивні пошуки, існування таких об'єктів не виявлено.

Так само магнітні дефекти можуть утворювати лінійні дефекти - космічні струни. Ці нитчасті об'єкти мають характерну лінійну масу порядку  $10^{22} \text{г} \cdot \text{см}^{-1}$  і можуть бути як закритими, так і відкритими. Завдяки гравітаційному притягання вони могли служити зародками для конденсації речовини, що призвело до утворення галактик.

Великі маси дозволяли б виявити такі струни під дією гравітаційних лінз. Струни спотворювали б навколишній простір таким чином, щоб було створено подвійне зображення предметів, що стоять за ними. Світло від дуже віддалених галактик могло відхилити цю лінію згідно із законами загальної теорії гравітації. Спостерігач на Землі побачив би два сусідні дзеркальні зображення галактик з однаковим спектральним складом. Цей ефект гравітаційних лінз був уже виявлений для далеких квазарів, коли галактика, розташована між квазаром та Землею, служила гравітаційною лінзою.

Також обговорюється можливість надпровідного стану в космічних струнах. Електрично заряджені частинки, такі як електрони, в симетричному вакуумі, струни були б без маси, оскільки вони набувають своїх мас лише внаслідок симетрії, що пробивається через механізм Хіггса. Так, пари частинка-античастинка, що рухаються зі швидкістю світла, можуть утворюватися тут при дуже низькому споживанні енергії. Результат покаже - надпровідний струм. Надпровідні струни можуть перейти у збуджений стан, взаємодіючи із зарядженими частинками, видалити це збудження можна буде шляхом випромінювання радіохвиль.

Також були розглядані дефекти більш високих розмірів, включаючи двовимірні "доменні стінки" і, зокрема, тривимірні дефекти або "текстури".

### **Інші екзотичні кандидати**

*Тіньова матерія.* Якщо припустити, що струни є одновимірними довгими об'єктами, в теоріях суперструнних спробується повторити успіх суперсиметричних моделей в усуненні розбіжностей також у силі тяжіння та проникненні енергетичних областей за масою Планка. З математичної точки зору вільних від аномалій, за допомогою надструнних теорій можна отримати лише для калібрувальних груп  $SO(32)$  і  $E_8 \times E_8$ . Останній розділений на два сектори, один описує звичайну матерію, а інший відповідає тіньовій речовині ( $E_8$ ). Ці два сектори можуть взаємодіяти один з одним лише гравітаційно.

"Кваркові самородки" були запропоновані в 1984 р. Це стійкі макроскопічні об'єкти, виготовлені з кваркової речовини, що складається з  $u$ -,



d- і s-кварків. Щільність цих об'єктів лежить в області ядерної щільності  $10^{15}$  г/см<sup>3</sup>, а маси можуть коливатися від кількох ГеВ/с<sup>2</sup> до значень мас нейтронних зірок. Вони утворюються під час гіпотетичного фазового переходу QCD, але зазвичай вважаються вкрай малоймовірними.

### 1.3.3. Модифіковані теорії (космологічна стала, MOND-теорія, що залежить від часу гравітаційна стала)

Спочатку, космологічна константа була введена Ейнштейном у рівняння поля ОТО, щоб забезпечити, згідно з поглядами того часу, стаціонарність Всесвіту. Однак після відкриття Хаббла в кінці 1920-х років розширення Всесвіту це виявилось зайвим. Тому ми почали вважати, що  $\Lambda = 0$ . Однак у сучасних теоріях поля ця космологічна константа трактується як щільність енергії вакууму  $\rho_v$ . Отримуємо таке рівняння:

$$\Lambda = \frac{8\pi G}{c^2} \rho_v. \quad (1.25)$$

Випадок  $\Lambda = 0$  відповідає припущенню, відповідає припущенню, що вакуум не сприяє щільності енергії. Ця картина відповідає ідеям класичної фізики. У теорії квантових полів вакуум містить різні квантові поля, які знаходяться в стані з найменшою енергією, що не обов'язково дорівнює нулю.

Розглядаючи ненульові космологічні константи, використовуючи співвідношення:

$$\rho_{c0} = \frac{3H_0^2 - \Lambda c^2}{8\pi G}, \quad \Omega_0 = \frac{8\pi G \rho_0}{3H_0^2 - \Lambda c^2}, \quad (1.26)$$

ми отримуємо більш низьку критичну щільність і більш високе значення параметра щільності, ніж очікувалося, згідно з формулами вище. Астрономічні спостереження на основі обчислення кількості галактик дають верхню межу  $\Lambda < 3 \cdot 10^{-56}$  см<sup>-2</sup> для сучасної космологічної постійної.

Оскільки критична щільність  $\rho_{c0}$  не може бути негативною, легко оцінити верхню межу:

$$\Lambda \leq \frac{3H_{0,max}^2}{c^2} \approx 3.5 \cdot 10^{-56} \text{см}^{-2}, \quad (1.27)$$

де для  $H_{0,max}$  використовується значення  $100 \text{ км} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{Мпс}^{-1}$ . Незважаючи на те, що нульова космологічна константа стала необхідною для інтерпретації ранньої фази еволюції, деякі вчені дійшли висновку, що  $\Lambda$  не, рівна 0, також може зіграти роль на наступних етапах розвитку Всесвіту.

Космологічна константа:

$$\Lambda = \frac{3H_0^2}{c^2} \left( 1 - \frac{\Omega(\Lambda = 0)}{\Omega(\Lambda \neq 0)} \right), \quad (1.28)$$

може привести до значення  $\Omega$  ( $\Lambda = 0$ ), хоча і насправді  $\Omega$  ( $\Lambda \neq 0$ ). Параметр  $\Omega$  ( $\Lambda = 0$ ), визначений із  $\rho_0$ , забезпечив би  $\Omega = 1$ , як це потрібно в моделях інфляції, за умови, що космологічна константа дорівнює:

$$\Lambda = \frac{3H_0^2}{c^2} (1 - \Omega(\Lambda = 0)), \quad (1.29)$$

Використання числових значень:

$$H_0 = 75 \pm 25 \text{ км} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{Мпс}^{-1} \text{ і } \Omega_{0,obs} = 0.2 \pm 0.1, \quad (1.30)$$

веде до:

$$\Lambda = (1.6 \pm 1.1) \cdot 10^{-56} \text{см}^{-2}. \quad (1.31)$$

Щільність енергії вакууму, що відповідає цьому значенню, може вирішити протиріччя між спостережуваним значенням параметра щільності та значенням  $\Omega = 1$ , що вимушене сучасними теоріями.

Окрім введення ненульової космологічної константи, існують і інші моделі, які усувають хоча б деякі проблеми, не включаючи гіпотезу про темну матерію.

### **Теорія MOND (модифікована ньютонівська динаміка)**

Ця теорія передбачає, що закон гравітації відрізняється від звичайної ньютонівської форми і виглядає так:

$$a_G = \frac{Gm}{r^2} + \frac{\sqrt{GMa_0}}{r}. \quad (1.32)$$

У цьому випадку сила тяжіння буде більшою і повинна компенсуватися більш швидким періодичним рухом, що здатне пояснити плоску поведінку обертових кривих.

### **Гравітаційна стала, що залежить від часу.**

Залежність часу гравітаційної константи  $G(t)$  від часу може мати велике значення для процесу утворення галактики. Однак точні вимірювання до цих пір не вказували на часову зміну  $G$ .

## **1.4 Аксіони. Експерименти по їх реєстрації**

### **1.4.1 Влістивості аксіонів і їх роль у моделях темної матерії**

Основними кандидатами на роль частинок темної матерії є WIMP-и (Weakly Interacting Massive Particles - Слабо Взаємодіючі Масивні частки). Однак паралельно з ними в теорії розглядаються аксіони - гіпотетичні частинки, вивчення яких на даний момент просувається навіть успішніше через добру перспективу їх прямого експериментального спостереження. Вони можуть виявитися компонентами холодної темної матерії, утвореної на ранніх етапах еволюції Всесвіту в результаті фазового переходу. Головна відмінність їх від WIMP-ів полягає в масі. Аксіони (а також і деякі інші подібні частинки, звані загальним терміном WISP - Weakly Interacting Slim Particles) мають дуже маленьку масу.

До кандидатів на роль частинок темної матерії пред'являються три основні вимоги: вони повинні дуже слабо взаємодіяти з частками Стандартної Моделі і між собою, мати нерелятивістські імпульси, достатні для того, щоб утворювати астрофізичні структури (наприклад, галактичні гало, які, як припускають, якраз складаються з темної матерії), і бути стабільними в космологічних масштабах простору-часу. Введені відповідним чином аксіони задовольняють всім цим вимогам, причому остання - стабільність - безпосередньо випливає з їх маленькою маси і слабкості взаємодії. Справді, така маса різко зменшує фазовий простір і типи можливих продуктів розпаду, що автоматично призводить до збільшення часу життя [14].

Аксіони були введені через порушення CP-симетрії в сильних взаємодіях [15]. Як тільки виявилось, що параметрами там є не тільки константа сильної взаємодії і маси кварків, а й величина, пов'язана з визначником кваркової матриці - кутовий параметр. Частина лагранжіану квантової хромодинаміки, в якій він виникає, виглядає наступним чином:

$$\mathcal{L} = -\frac{a_s}{8\pi} \theta G_{\mu\nu}^a \tilde{G}^{a,\mu\nu}, \quad (1.33)$$

де  $a_s$  - константа сильної взаємодії,  $G_{\mu\nu}^a$  - поля глюонів. Параметр  $\theta$  визначається експериментально.

Звідси випливає, що  $G_{\mu\nu}^a \tilde{G}^{a,\mu\nu} \approx E^a E^b$  і порушується як C, так і P симетрія. Один з найбільш точних способів визначення його вакуумного значення - через електричний дипольний момент нейтрона. Модуль цієї величини пов'язаний з новим параметром простою лінійною залежністю:

$$|d_n| \sim \frac{e}{m_n} \left( \frac{m_q}{m_n} \right) |\bar{\theta}| \sim 10^{-16} |\bar{\theta}| e, \quad (1.34)$$

де  $m_n$  – маса нейтрона,  $m_q$  – маси кварків,  $e$  – заряд електрона. Експериментальне значення цієї величини складає  $|d_n| < 2.9 \cdot 10^{-26} e \text{ см}$ , і це відповідає параметру  $|\bar{\theta}| \leq 10^{-10}$ .

Однак в теорії немає пояснення його такій маленькій величині, передбачається, що він може бути більше, в межах від  $[-\pi; \pi]$ . У цьому полягає проблема квантової хромодинаміки, для вирішення якої були запропоновані аксіон Печеї (R. D. Peccei) і Квінн (H. R. Quinn) в 1977 році. Основна ідея полягала в наступному: ми вводимо нове поле, (аксіонне), яке зменшує кутовий параметр практично до нуля. Відбувається це за механізмом спонтанного порушення, що схоже на механізм Хіггса. Тобто аксіон являє собою не що інше, як псевдо-голдстоунівський бозон, що виникає в результаті спонтанного порушення симетрії Печеї-Квінн. Цікаво, що сама назва частинці була дана по торговій марці прального порошку, підкреслюючи той факт, що аксіони ніби «очищують» квантову хромодинаміку від проблеми з порушенням CP-симетрії.

Частинки, описані введенням таким чином полем, мають ненульову, але дуже маленьку масу. Вона може бути розрахована шляхом зіставлення процесів, при яких кварки і глюони отримуються як результат взаємодії аксіонів, і аналогічних процесів при більш низьких енергіях, коли утворюються мезони і баріони. Можна записати вираз для маси аксіонів через маси кварків:

$$m_a = \frac{m_\pi f_\pi}{f_a} \frac{\sqrt{m_u m_d}}{m_u + m_d}. \quad (1.35)$$

Тут вводиться нова константа  $f_a$ , так звана константа розпаду аксіонів.

Таким чином, ми бачимо, що аксіони дійсно представляють собою хороший приклад кандидатів на роль частинок темної матерії: вони дуже легкі і дуже слабо взаємодіють. Зокрема, їх взаємодія, що призводить до утворення фотонів, описується лагранжіаном:

$$\mathcal{L}_{a\gamma\gamma} = -\frac{1}{4} g_{a\gamma} F_{\mu\nu} \tilde{F}^{\mu\nu}, \quad (1.36)$$

також мале, як константа взаємодії:

$$g_{a\gamma} = \frac{a}{2\pi} \left( c_{a\gamma} - \frac{2}{3} \frac{m_u + 4m_d}{m_u + m_d} \right) \sim 10^{-13} \text{GeV}^{-1} \left( \frac{10^{10} \text{GeV}}{f_a} \right). \quad (1.37)$$

Однак, якщо ця реакція буде можлива, то її спостереження могло б стати доказом існування аксіонів. Для її реалізації потрібні великі електромагнітні поля, які в природних умовах присутні в космічному середовищі і які намагаються відтворити в лабораторних експериментах.

Отриманий в результаті внесок в густину енергії пропорційний константі розпаду в степені  $1/6$  і, в найпростішому випадку, досягає критичної густини енергії (по космологічним оцінками), якщо взяти параметр  $f_a = 10^{12} \text{GeV}$ . З цього випливає, що маса аксіонів, швидше за все, лежить в області  $10^{-5} \text{eV}$  [15].

$$f_a > 4 \cdot 10^8 \text{GeV} \Rightarrow m_a < 16 \text{eV}. \quad (1.38)$$

На рис. 1.1 представлені деякі області значень константи розпаду і, відповідно, маси гіпотетичної частинки, дослідженої різними експериментами.

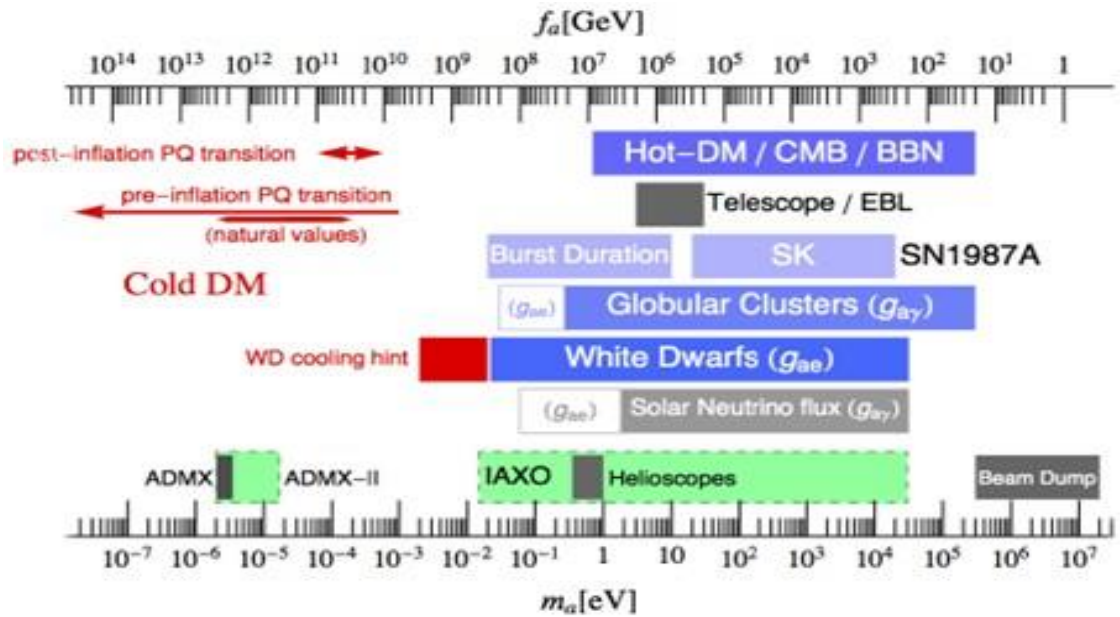


Рисунок 1.1 – виключені області значень маси і константи розпаду аксіонів в моделях темної матерії [15].

Має сенс також шукати аксіонну темну матерію в більш широкому діапазоні мас, тому що обмеження на неї не жорстке. Наприклад, якщо після фазового переходу Печеї-Квінн, в якому спонтанно порушилася симетрія, сталася інфляція, то внесок аксіонів в космологічну густину енергії відповідає їх масі в районі  $10^{-3} - 10^{-2}$  eV. З іншого боку, якщо інфляція мала місце, то аксіонне поле стає однорідним і може досягти рекордно низьких значень, до  $10^{-5}$  eV. Теорія струн передбачає планківські масштаби для константи  $f_a$ , що теж призводить до дуже маленької маси аксіонів. Вона передбачає і інші аксіоно-подібні частинки на додаток до тих, що були введені для вирішення CP-парадоксу. Для них в загальному випадку немає співвідношення між константою взаємодії і масою.

Ці аксіоно-подібні частки (axion-like particles - ALPs), гіпотетично народжуються в вакуумі, можуть також становити холодну темну матерію (відповідні області зображені на рис. 1.1).

### 1.4.2. Способи детектування аксіонів і аксіоно-подібних частинок

Електромагнітна взаємодія аксіонів, що призводить до народження двох фотонів, дається виразом:

$$\mathcal{L}_{a\gamma\gamma} = -\frac{1}{4} g_{a\gamma} F_{\mu\nu} \tilde{F}^{\mu\nu}, \quad (1.39)$$

де  $F$  - тензор електромагнітного поля, компоненти якого пропорційні напруженості електричного і магнітного полів. Таким чином, маємо:

$$\mathcal{L}_{a\gamma\gamma} = -g_a(x) \vec{E}(x) \vec{B}(x). \quad (1.40)$$

Параметрами полів можна маніпулювати в лабораторних умовах, що робиться в різних експериментах, наприклад, за допомогою мікрохвильового резонатора в експерименті ADMX (Axion Dark Matter eXperiment).

Удосконалення експериментальної установки проекту AMDX, назване AMDX-HF (High Frequency), має дозволити просунутися до більш високих значень константи розпаду. Це особливо перспективно через існуючу залежності між перетином взаємодії і даної константою. Амплітуда процесу повинна бути пропорційна її квадрату і сильно зростати. Але проблема полягає в тому, що для того, щоб провести вимірювання, потрібні мікрохвильові резонатори з частотою, рівній масі аксіонів за даних умов. А це вимагає створення порожнин в резонаторі розміром, на якому могли б проходити осциляції з такою довжиною хвилі, обернено пропорційній масі. Для аксіонів в теорії Великого Об'єднання (планківські масштаби GeV) резонуючі порожнини повинні досягати метрів.

В якості альтернативного варіанту можна спостерігати процеси на Сонці спеціальними телескопами (геліоскоп), мета яких - побачити народження аксіонами фотонів в сонячному спектрі. Рис. 1.2 показує обмеження, що накладаються на константу взаємодії на основі різних астрофізичних



спостережень. Область великих мас і великих значень константи вивчені краще, ніж області низьких значень. Точки на діаграмі, що відповідають аксіонам квантової хромодинаміки, швидше за все, недосяжні в сучасних лабораторних експериментах.

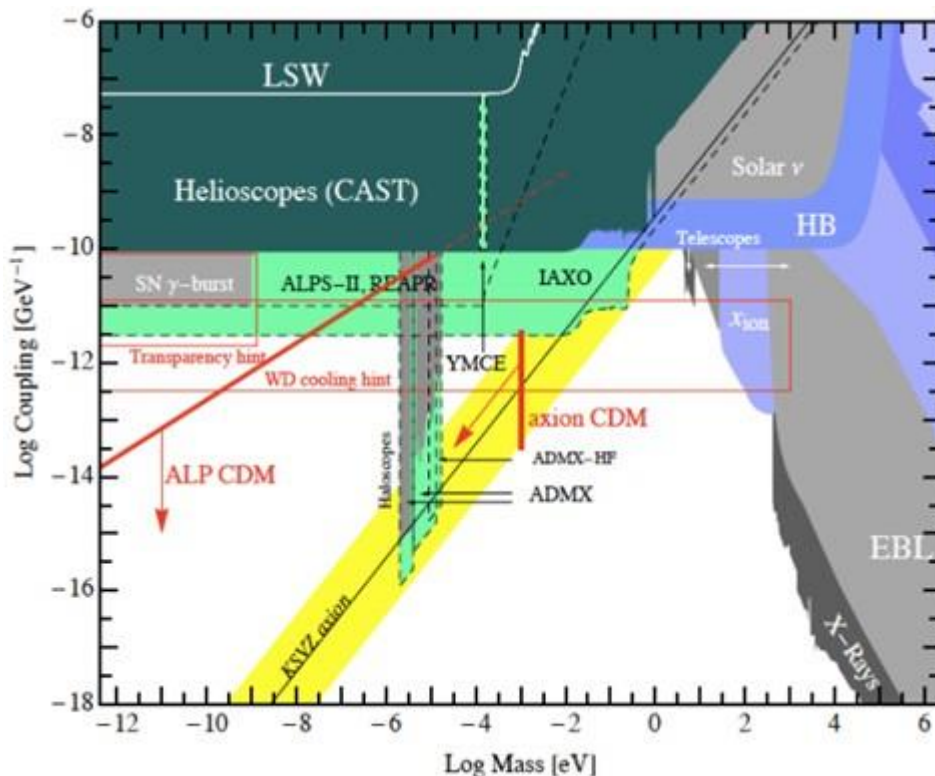


Рисунок 1.2 – логарифм константи взаємодії аксіонів і фотонів в процесі народження фотонів

В залежності від логарифму маси аксіонів і аксіоно-подібних частинок. Область, що відповідає аксіонам, введеним в квантовій хромодинаміці, позначена жовтою смугою. Обмеження наведені за результатами різних експериментів, описаних в [14].

Іншою важливою властивістю, що дозволяє висунути методи по експериментальній реєстрації аксіонів, є те, що їх поле осцилює з частотою, що дорівнює їх масі [16]. Тому є проекти, в яких вимірюється розподіл енергії класичного фонового поля. Наприклад, як вже було згадано, оператор  $\frac{a}{f_a} G_{\mu\nu} \tilde{G}^{\mu\nu}$  в лагранжіані пов'язаний із змінним в часі електричним дипольним моментом. Він осцилює на тій же частоті (відповідно до маси аксіонів), в

діапазоні  $10^3 - 10^6$  Гц. Але навіть якщо частинки виникають в процесах фізики надвисоких енергій, їх маса виявляється замалою, а осциляції моменту - занадто швидкими, щоб їх можна було зареєструвати в лабораторії. Тому даний підхід до дослідження передбачає вимірювання часових варіацій поля на Хабблівському масштабі за допомогою спеціальних телескопів. Також, теоретично, емісія аксіонів може привести до надлишку охолодження при вибуху наднових, і певні обмеження, отримані з спостереження SN1987A, показані на рис. 1.1.

Частина лагранжіану, що відповідає за взаємодію аксіонів і аксіоно-подібних частинок з утворенням нуклонів виглядає наступним чином:

$$g_{aNN}(\partial_\mu a)\bar{N}\gamma^\mu\gamma^5 N, \quad (1.41)$$

де  $g_{aNN}$  – відповідна константа зв'язку. Вона також обернено пропорційна параметру  $f_a$ . Дана взаємодія має два основні ефекти, важливі для дослідження кандидатів на роль темної матерії. По-перше, процес призводить до втрати енергії в результаті емісії аксіоно-подібних частинок, в тих же наднових і інших астрофізичних об'єктах. По-друге, буде відбуватися взаємодія між нуклонами за допомогою обміну цієї часткою, і сила взаємодії залежить від спіну. Тому, якщо використовувати мішені і зразки з різною поляризацією спіна, то можна шукати подібні спин-спінові взаємодії і звідси теж отримувати обмеження на константу  $g_{aNN}$ .

Одночасно розгляд взаємодії аксіонів і нуклонів видає ще один цікавий ефект, якщо припустити існування фонового аксіонового поля темної матерії. В такому випадку спин нуклона буде прецесувати в результаті взаємодії навколо осі, спрямованої уздовж власного моменту аксіоно-подібної частинки. Гамільтоніан, що визначає енергію такого процесу, запишеться як:

$$H_N = g_{aNN}\vec{\nabla}a\sigma_N, \quad (1.42)$$

де  $\sigma_N$  – оператор спіну нуклона.

Рух Землі навколо центру Галактики призводить до відносної швидкості між нею (і складовими її нуклонами в ядрах речовини) і полем темної матерії. І якщо спіни нуклонів виявляться не співнаправленими з рухом Землі, то вони почнуть прецесувати. Можна оцінити амплітуду прецесії. Для цього прийнемо галактичну швидкість рівну  $v \sim 10^{-3}c$  ( $c$  - швидкість світла). Власний момент аксіонів  $\vec{\nabla}a \sim 10^{-3}\partial_0 a$  в першому наближенні, якщо розглядати поле темної матерії як вільне скалярний поле, з моментом, що осцилює в потенціалі по закону  $a \approx a_0 \cos(m_a t)$ . Звідси виходить, що похідна  $\partial_0 a$  має амплітуду  $a_0 m_a$ , пропорційну масі і частота також дорівнює  $m_a$ . Густина енергії осцилює з амплітудою  $\frac{1}{2}m_a^2 a_0^2$ , що можна намагатися реєструвати при спостереженні розподілу густини темної матерії.

Далі буде дано опис деяких експериментів з детектування частинок темної матерії за допомогою різних методик, наведені схеми установок і попередні результати.

### 1.4.3 ADMX експеримент [17],[18]

Експеримент ADMX (Axion Dark Matter Experiment) розташовується в Центрі експериментальної ядерної фізики і астрофізики (CENPA) в університеті штату Вашингтон. Головне завдання його - пошук холодної темної матерії за методом, що використовує великий надпровідний соленоїд. Магнітне поле, створюване ним, однорідне і становить 7,6 Тл. Відповідно до теорії, аксіони в таких умовах повинні перетворюватися на низькоенергетичні фотони. Мікрохвильовий резонатор циліндричної форми, радіусом 21 см і довжиною 100 см використовується для посилення сигналу, який потім надходить на вихідну антену. На рис. 4 зображена схема повного кола, в яку включені ще три перетворювача: передпідсилювач SQUID (superconducting quantum interference device) і пара підсилювачів HFET (heterostructure field-

effect transistor). 4 останніх елемента доводять сигнал до кімнатної температури.

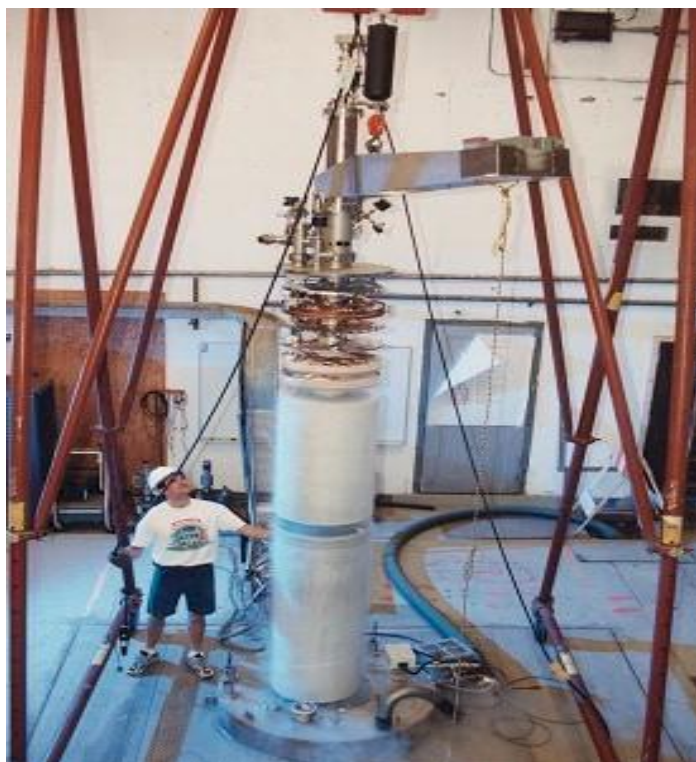


Рисунок 1.3 – детекторний комплекс ADMX виглядає не надто великим, щоб зробити велике відкриття. Це 4-х метровий металевий циліндр, закріплений на стіні [18].

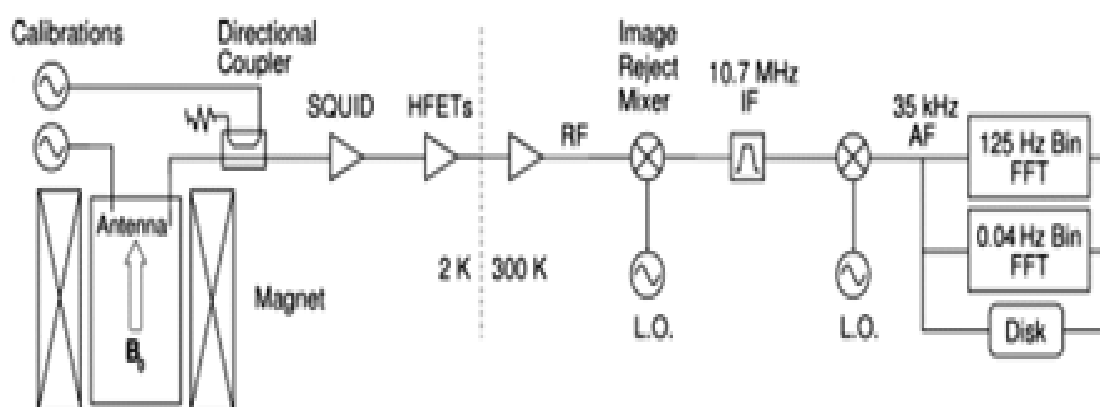


Рисунок 1.4 – коло посилення і реєстрації даних, що реалізується в експерименті ADMX [18].

На практиці експеримент вимагає дуже великих зусиль, тому що ймовірність перетворення аксіона у фотон мала. Сигнал з'являється тільки тоді, коли резонансна частота порожнини відповідає масі аксіону.

У липні 2012 року стартувала наступна стадія проекту - ADMX-HF (Axion Dark Matter eXperiment High-Frequency), яка використовує той же метод реєстрації, але оптимізована під більш високий діапазон частот. Магнітне поле соленоїда було доведено до 9 Тл, а радіус і довжина резонатора склали відповідно 5 см і 25 см. Замість SQUID поставили параметричний підсилювач Джозефсона (Josephson Parametric Amplifier), що працює на 4 - 8 ГГц. Цей детектор націлений на пошук аксіонів в діапазоні мас  $19 \div 24$  мкеВ. Рис. 5. демонструє області, виключені з розгляду за результатами вже проведених спостережень в даному проекті.

ADMX також співпрацює з такими організаціями, як LLNL (Lawrence Livermore National Laboratory), Флоридський університет, Каліфорнійський університет в Берклі і NRAO (National Radio Astronomy Observatory).

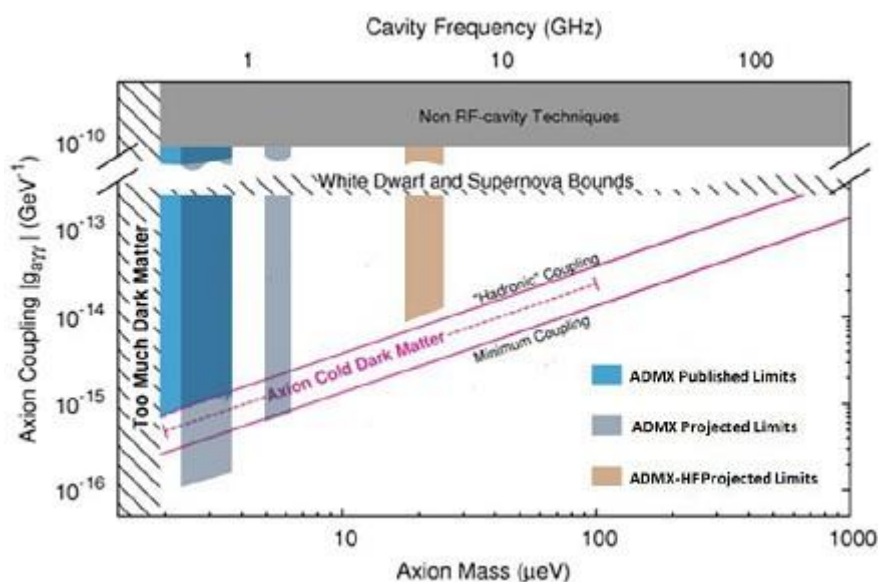


Рисунок 1.5 – діапазони константи зв'язку і маси аксіонів, за даними експериментів ADMX і ADMX-HF.

Підсилювачі та інша електроніка в процесі роботи також виробляють шум, і, щоб позбутися від нього, потрібно зібрати велику статистику.

Основний фон теплових перешкод виникає від резонуючої порожнини і від електричних приймачів. Наприклад, SQUID являє собою тонкі кільця надпровідного металу, щоз'єднані паралельно.

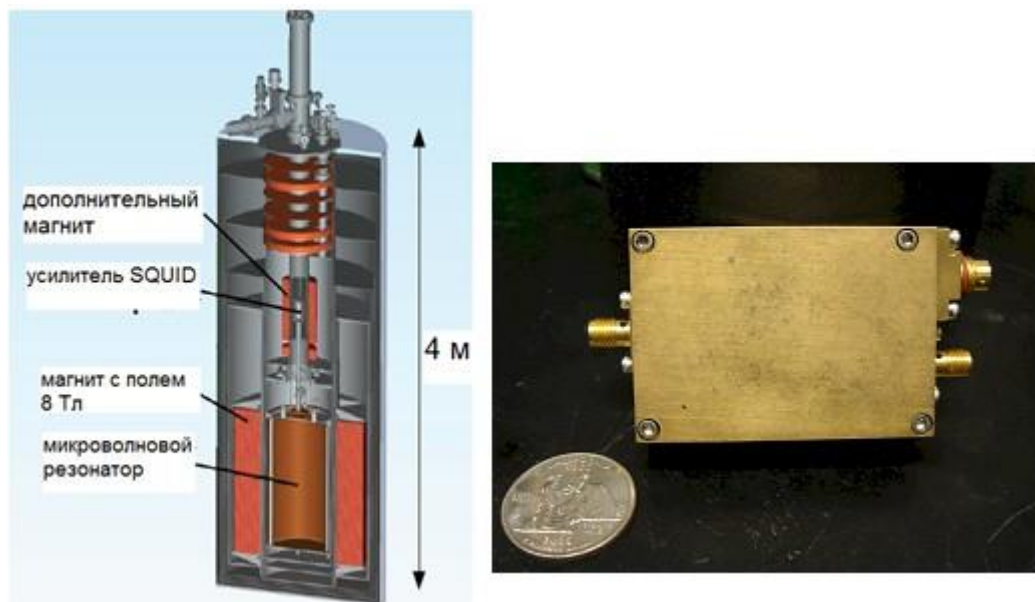


Рисунок 1.6 - конструкція детектора (зліва) і підсилювач SQUID (праворуч).

#### 1.4.4. CERN Axion Solar Telescope (CAST) [19, 20, 21]

Цей експеримент був сконструйований для пошуку аксіонів в потоках від Сонця. Частинки темної матерії, які народжуються в надрах зірки, взаємодіють з утворенням 2-х фотонів однакової енергії. Даний факт дозволяє використовувати тригери в соленоїдах з сильним магнітним полем (9 Тл). Адронні аксіони - саме на них головним чином націлений CAST - в теорії становлять гарячу темну матерію. На рис. 1.7 наведені основні діаграми, що представляють інтерес для даного експерименту. Пунктирна лінія а відповідає аксіону.

Ефект Примакова полягає в резонансному перетворенні фотона в статичному електричному або магнітному полі (наприклад, в полі ядра) в масивну нейтральну псевдоскалярну частинку, якою може бути в тому числі аксіон. Частинки, які народжуються подібним чином, здатні розпадатися на

два фотони і конвертуватися в фотон в електромагнітному полі (зворотний ефект Примакова). Тому, якщо аксіони дійсно існують і мають таку природу, то в реєструючій апаратурі детектора виникає ефект Примакова - конверсія фотона в віртуальний аксіон і назад. Що призводить до виникнення оптичних властивостей (подвійне променезаломлення, дисперсія) у вакууму в магнітному або електричному полі. На даному ефекті Примакова (прямому і / або зворотному) засновано багато експерименти з пошуку аксіонів.

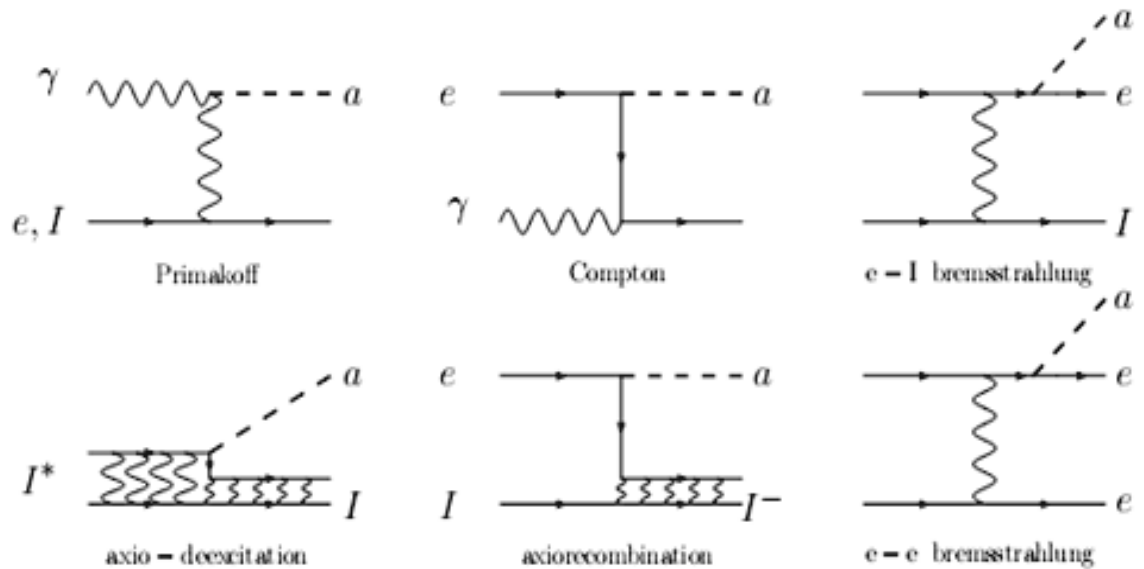


Рисунок 1.7 – діаграма Фейнмана основних процесів, що дають внесок в потоки аксіонів від Сонця: ефект Примакова, Комптонівське розсіяння, розсіяння електрона на електроні і електрона на йоні, рекомбінація і дезбудження.

Вклади різних процесів ще належить оцінити, однак вже зараз можна приблизно вказати діапазони енергій - в районі декількох кеВ. Формули для потоків, доступних для реєстрації (в одиницях  $1 / (\text{м}^2 \cdot \text{год кеВ})$ ):

$$\left. \frac{d\Phi_a}{d\omega} \right|_p = 2 \cdot 10^{18} \left( \frac{g_{a\gamma}}{10^{-12} \text{ГеВ}^{-1}} \right) \omega^{2.45} e^{-8.29\omega}, \quad (1.43)$$



$$\left. \frac{d\Phi_a}{d\omega} \right|_c = 4.2 \cdot 10^{18} \left( \frac{g_{ab}}{10^{-13} \text{GeV}^{-1}} \right) \omega^{2.987} e^{-0.776\omega}, \quad (1.44)$$

$$\left. \frac{d\Phi_a}{d\omega} \right|_B = 8.3 \cdot 10^{20} \left( \frac{g_{ab}}{10^{-13} \text{GeV}^{-1}} \right) \frac{\omega}{1 + 0.667\omega^{1.278}} e^{-0.77\omega}. \quad (1.45)$$

де  $g$  – константи відповідних взаємодій, а  $\omega$  – частота аксіона.

Детектор розташований в ЦЕРН в Швейцарії. Він почав збір даних в 2003 році і пропрацював весь 2004 рік (перша фаза проекту). Хоча CAST за цей час не виявив частинок темної матерії, він зміг встановити нову границю на константу взаємодії між аксіоном та фотоном. Для аксіонів з масою менше 0.02 еВ обмеження становило  $8.8 \cdot 10^{-11} \text{GeV}^{-1}$ .

Друга фаза, на якій чутливість була збільшена, простір між магнітами було заповнене гелієм. При змінному тиску газу вдалося просканувати діапазон до 0,39 еВ для мас аксіонів, що дало новий ліміт на аксіон-фотонну константу.

Наступний етап тривав з 2008 по 2011 рік, коли між магнітами був поміщений гелій-3. Додатково була перевірена область від 0.39 до 0.64 еВ. Потім в 2012 році знову застосовували гелій-4, в діапазоні мас до 0,4 еВ.

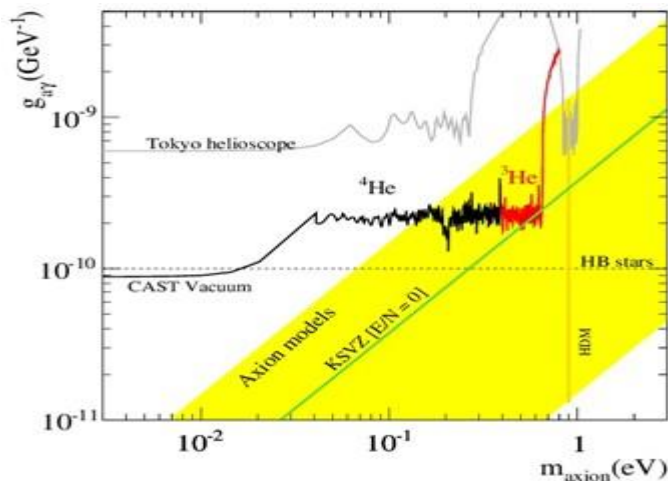


Рисунок 1.8 – обмеження на константу взаємодії аксіону та фотону в залежності від маси аксіона за результатами роботи експерименту CAST.





Рисунок 1.9 – фотографія детектору.

Детектор реєстрував сонячне випромінювання близько трьох годин в день одним торцем на сході і іншим на заході. Іншу частину дня він не був спрямований на Сонце і використовувався для вимірювання фону. Сигнал від аксіонів очікувався як перевищення фону рентгенівських фотонів в періоди, коли Сонце світило всередину магніту. Частина обладнання для реєстрації рентгенівського випромінювання спочатку призначалася для космічного рентгенівського телескопу ABRIXAS, але потім була адаптована під специфіку експерименту CAST. У колаборації CAST працюють фізики з CERN і 14-ти інших наукових центрів Німеччини, Греції, Іспанії, Канади, Росії, США, Хорватії та Франції.

## **ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 1**

З цього розділу можна зробити висновок, що із приведених математичних викладів випливає велика імовірність того, що темна матерія існує. Одним із основних кандидатів на роль темної матерії може буди аксіон.

## РОЗДІЛ 2. ЧИСЕЛЬНЕ РІШЕННЯ ДИФЕРЕНЦІЙНИХ РІВНЯНЬ МЕТОДОМ КІНЦЕВИХ РІЗНИЦЬ

У цьому розділі розглядається метод кінцевих різниць, який є одним з найбільш поширених чисельних методів розв'язання рівнянь з частинними похідними (рівнянь математичної фізики) [22].

### 2.1. Чисельне рішення диференціальних рівнянь із частинними похідними

#### Постановка задачі для рівнянь параболічного типу

Класичним прикладом рівняння параболічного типу є рівняння теплопровідності (дифузії). В одновимірному по простору випадку однорідне (без джерел енергії) рівняння теплопровідності має вигляд:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 < x < l, t > 0. \quad (2.1)$$

Якщо на границях  $x = 0$  та  $x = l$  задані значення шуканої функції  $u(x, t)$  у вигляді:

$$u(0, t) = \varphi_0(t), \quad x = 0, \quad t > 0; \quad (2.2)$$

$$u(l, t) = \varphi_l(t), \quad x = l, \quad t > 0;$$

тобто *граничні умови першого роду*, і, крім того, задані початкові умови

$$u(x, 0) = \psi(x), \quad 0 \leq x \leq l, \quad t = 0, \quad (2.3)$$

то задачу (2.1-2.3) називають першою початково-крайовою задачею для рівняння теплопровідності (2.1) .

У термінах теорії теплообміну  $u(x, t)$  – розподіл температури в просторово-часовій області  $\Omega \times T = \{0 \leq x \leq l; 0 \leq t \leq T\}$ ,  $a^2$  – коефіцієнт теплопровідності, а (1.2), (1.3) за допомогою функцій  $\varphi_0(t), \varphi_l(t)$  задають температуру на кордонах  $x = 0$  і  $x = l$ .

Якщо на границях  $x = 0$  і  $x = l$  задані значення довільних величин шуканої функції по просторовій змінній:

$$\frac{\partial u(0, t)}{\partial x} = \varphi_0(t), \quad x = 0, \quad t > 0; \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial u(l, t)}{\partial x} = \varphi_l(t), \quad x = l, \quad t > 0; \quad (2.5)$$

тобто *граничні умови другого роду*, то задачу (2.1), (2.3), (2.4), (2.5) називають другою початково-крайовою задачею для рівняння теплопровідності (2.1). У термінах теорії теплообміну на границях в цьому випадку задані теплові потоки.

Якщо на границях задані лінійні комбінації шуканої функції та її похідні по просторовій змінній:

$$\alpha \frac{\partial u(0, t)}{\partial x} + \beta u(0, t) = \varphi_0(t), \quad x = 0, \quad t > 0; \quad (2.6)$$

$$\gamma \frac{\partial u(l, t)}{\partial x} + \delta u(l, t) = \varphi_l(t), \quad x = l, \quad t > 0; \quad (2.7)$$

тобто *граничні умови третього роду*, то задачу (2.1), (2.3), (2.6), (2.7) називають третьою початково-крайовою задачею для рівняння теплопровідності (2.1). У термінах теорії теплообміну граничні умови (2.6), (2.7) задають теплообмін між газоподібним чи рідким середовищем і границями розрахункової області з невідомими температурами  $u(0, t), u(l, t)$ .

Для просторових задач теплопровідної області  $\bar{\Omega} = \Omega + \Gamma$  перша початково-крайова задача має вигляд:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right), & M(x, y, z) \in \Omega, & t > 0; \end{cases} \quad (2.8)$$

$$\begin{cases} u(M, t) = \varphi(M, t), & M(x, y, z) \in \Gamma, & t > 0; \end{cases} \quad (2.9)$$

$$\begin{cases} u(M, 0) = \varphi(M, 0), & M(x, y, z) \in \bar{\Omega}, & t > 0; \end{cases} \quad (2.10)$$

Аналогічно ставиться друга і третя початково-крайові задачі для просторового рівняння задачі (2.8) - (2.10).

На практиці часто ставляться початково-крайові задачі теплопровідності зі змішаними крайовими умовами, коли на границях задаються граничні умови різних родів [23].

## 2.2. Поняття про метод кінцевих різниць. Застосування методу кінцевих різниць до вирішення рівнянь параболічного типу

Основні визначення, пов'язані з методом кінцевих різниць, розглянемо на прикладі кінцево-різнісного рішення першої початково-крайової задачі для рівняння теплопровідності (2.1) - (2.3).

Нанесемо на просторово-часову область  $0 \leq x \leq l$ ,  $0 \leq t \leq T$  кінцево-різнісну сітку  $\omega_{h,\tau}$ :

$$\omega_{h,\tau} = \{x_i = jh, j = \overline{0, N}; t^k = k\tau, k = \overline{0, K}\}, \quad (2.11)$$

з просторовим кроком  $h = l/N$  і кроком по часу  $\tau = T/K$  (рис. 2.1).

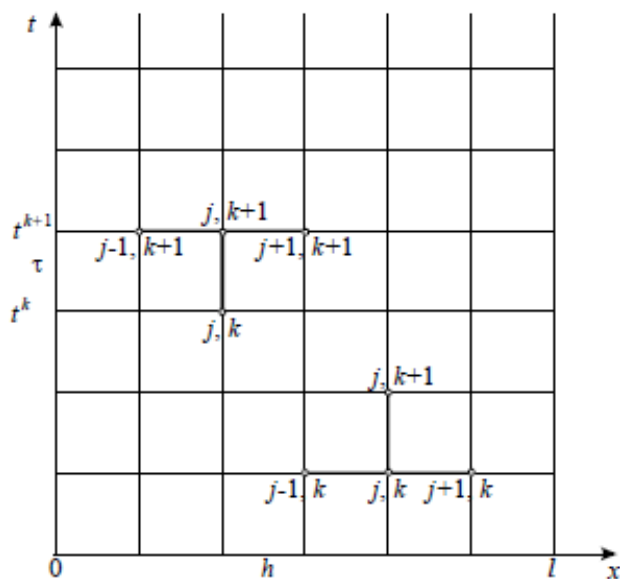


Рисунок 2.1 – кінцево-різнісна сітка

Введемо два тимчасових шари: нижній  $t^k = k\tau$ , на якому розподіл шуканої функції  $u(x_j, t^k)$ ,  $j = \overline{0, N}$  відомо (при  $k = 0$  розподіл визначається початковою умовою (2.3)  $u(x_j, t^0) = \psi(x_j)$ ) і верхній тимчасовий шар  $t^{k+1} = (k+1)\tau$ , на якому розподіл шуканої функції  $u(x_j, t^{k+1})$ ,  $j = \overline{0, N}$  підлягає визначенню.

Сітковою функцією задачі (2.1)-(2.3) (позначення  $u_j^k$ ) назвемо однозначне відображення *цілих* аргументів  $j, k$  у значення функції  $u_j^k = u(x_j, t^k)$ .

На введеній сітці (2.11) введемо сіткові функції,  $u_j^k, u_j^{k+1}$ , перша з яких відома, друга - підлягає визначенню. Для її визначення в задачі (2.1) - (2.3) замінімо (апроксимуємо) диференціальні оператори відношенням кінцевих різниць отримаємо:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_j^k = \frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\tau} + O(\tau), \quad (2.12)$$

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_j^k = \frac{u_{j+1}^k - 2u_j^k + u_{j-1}^k}{h^2} + O(h^2). \quad (2.13)$$

Підставляючи (2.12) та (2.13) в задачу (2.1-2.3), отримуємо *явну кінцево-різнісну схему* для цієї задачі у формі:

$$\begin{aligned} \frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\tau} &= a^2 \frac{u_{j+1}^k - 2u_j^k + u_{j-1}^k}{h^2} + O(\tau + h^2), j = \overline{1, N-1}, k = \overline{0, K-1}; \\ u_0^k &= \varphi_0(t^k), u_N^k = \varphi_l(t^k), k = \overline{0, K}; u_j^0 = \psi(x_j), j = \overline{0, N}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

де для кожного  $j$ -го рівняння усі значення сіткової функції відомі, за винятком одного –  $u_j^{k+1}$ , яке може бути визначене явно із співвідношень (2.14). У співвідношення (2.14) крайові умови ( $j = 0, j = N$ ) входять при значеннях  $j = 1$  і  $j = N - 1$ , а початкова умова – при  $k = 0$ .

Якщо в (2.14) диференційний оператор по просторовій змінній апроксимувати відношенням кінцевих різниць на верхньому шарі по часу:

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_j^k = \frac{u_{j+1}^{k+1} - 2u_j^{k+1} + u_{j-1}^{k+1}}{h^2} + O(h^2), \quad (2.15)$$

то після підстановки (2.12), (2.15) в задачу (2.1-2.3), отримаємо *неявну кінцево-різнісну схему* для цієї задачі:

$$\begin{aligned} \frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\tau} &= a^2 \frac{u_{j+1}^{k+1} - 2u_j^{k+1} + u_{j-1}^{k+1}}{h^2} + O(\tau + h^2), j = \overline{1, N-1}, k = \overline{0, K-1} \\ u_0^{k+1} &= \varphi_0(t^{k+1}), u_N^{k+1} = \varphi_l(t^{k+1}), k = \overline{0, K-1}; u_j^0 = \psi(x_j), j = \overline{0, N}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Тепер сіткову функцію  $u_j^{k+1}$  на верхньому часовому шарі можна отримати з рішення СЛАР (2.16) з трьохдіагональною матрицею. Ця СЛАР в формі, придатній для використання методу прогонки, має вигляд:

$$\begin{matrix} a_1 = 0 \\ c_{N-1} = 0 \end{matrix}; \begin{cases} b_1 u_1^{k+1} + c_1 u_2^{k+1} = d_1, & j = 1 \\ a_j u_{j-1}^{k+1} + b_j u_j^{k+1} + c_j u_{j+1}^{k+1} = d_j, & j = \overline{2, N-2} \\ a_{N-1} u_{N-2}^{k+1} + b_{N-1} u_{N-1}^{k+1} = d_{N-1}, & j = N-1, \end{cases}$$

де  $a_j = \sigma, j = \overline{2, N-1}, b_j = -(1 + 2\sigma), j = \overline{1, N-1}, c_j = \sigma, j = \overline{1, N-2};$   
 $d_j = -u_j^k, j = \overline{2, N-2}; d_1 = -(u_1^k + \sigma \varphi_0(t^{k+1})); d_{N-1} = -(u_{N-1}^k + \sigma \varphi_l(t^{k+1})), \sigma = \frac{a^2 \tau}{h^2}.$



Рисунок 2.2 – шаблони явної (зліва) та неявної (справа) різнісних схем рівняння теплопровідності).

Шаблоном кінцево-різнісної схеми називають її геометричну інтерпретацію на кінцево-різнісній сітці. На рис. 2.2 приведені шаблони для явної (2.14) та неявної (2.16) кінцево-різнісних схем при апроксимації задачі (2.1-2.3).

Явна кінцево-різнісна схема (2.14), записана у формі:

$$u_j^{k+1} = \sigma \cdot u_{j+1}^k + (1 - 2\sigma)u_j^k + \sigma \cdot u_{j-1}^k, \quad \sigma = \frac{a^2 \tau}{h^2}, j = \overline{1, N-1}, k = 0, 1, 2 \quad (2.17)$$

має ті переваги, що рішення на верхньому часовому шарі  $t^{k+1}$  виходить відразу (без рішення СЛАР) за значеннями сіткових функцій на нижньому



часовому шарі, де рішення відоме (при  $k = 0$  значення сіткової функції формуються з початкової умови (1.3)). Але ця ж схема має істотний недолік, оскільки вона є умовно стійкою з умовою  $\sigma = \frac{a^2 \tau}{h^2} \leq \frac{1}{2}$ , накладаємо на сіткові характеристики  $\tau$  і  $h$ .

З іншого боку, неявна кінцево-різнісна схема (1.16), записана у формі:

$$a_j u_{j-1}^{k+1} + b_j u_j^{k+1} + c_j u_{j+1}^{k+1} = d_j, j = \overline{1, N-1}, k = 1, 2, \dots \quad (2.18)$$

призводить до необхідності вирішувати СЛАР, але зате ця схема абсолютно стійка.

Проаналізуємо схеми (2.17), (2.18). Нехай точне рішення, яке не відоме, зростає за часом, тобто  $u_j^{k+1} > u_j^k$ . Тоді, відповідно до явної схемою (2.17) різнісне рішення буде заниженим порівняно з точним, тому що  $u_j^{k+1}$  визначається за меншим значенням сіткової функції на попередньому часовому шарі, оскільки рішення є зростаючим за часом.

Для неявної схеми (2.18) на зростаючому рішенні, навпаки, рішення завищено в порівнянні з точним, оскільки воно визначається за значеннями сіткової функції на верхньому часовому шарі [23].

На зворотньому вирішенні картина змінюється протилежним чином: явна кінцево-різнісна схема завищує рішення, а неявна - занижує (див. рис. 2.3)

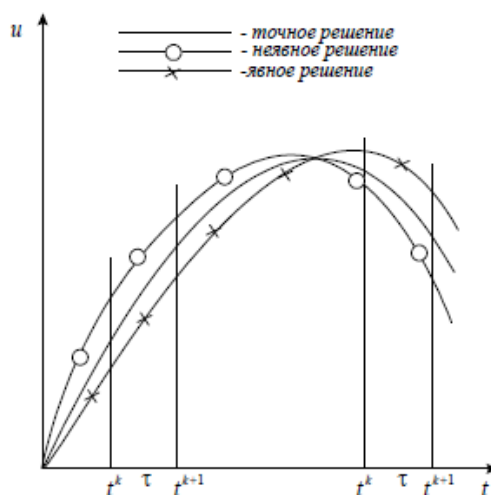


Рисунок 2.3 – двосторонній метод апроксимації

На основі цього аналізу виникла ідея про побудову більш точної неявно-явної кінцево-різнісної схеми з вагами при просторових кінцево-різнісних операторах, причому при подрібненні кроків  $\tau$  і  $h$  точне (невідоме) рішення може бути взято в "веделку" як завгодно вузьку, так як якщо явна і неявна схеми апроксимують диференціальну задачу і ці схеми стійкі, то при прямуванні сіткових характеристик  $\tau$  і  $h$  до нуля, рішення по явній та неявній схемах прямують до точного рішення з різних сторін.

Розглянемо неявно-явну схему з вагами для найпростішого рівняння теплопровідності:

$$\frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\tau} = \theta a^2 \frac{u_{j+1}^{k+1} - 2u_j^{k+1} + u_{j-1}^{k+1}}{h^2} + (1 - \theta) a^2 \frac{u_{j+1}^k - 2u_j^k + u_{j-1}^k}{h^2}, \quad (2.19)$$

де  $\theta$  – вага неявної частини кінцево-різнісної схеми,  $(1 - \theta)$  – вага для явної частини, причому  $0 \leq \theta \leq 1$ . При  $\theta = 1$  маємо повністю неявну схему, при  $\theta = 0$  – повністю явну схему, і при  $\theta = 1/2$  – схему Кранка-Ніколсона [24].

Для схеми Кранка-Ніколсона ( $\theta = 1/2$ ) порядок апроксимації становить  $O(\tau^2 + h^2)$ , тобто на один порядок за часом вище, ніж звичайні явна або неявна схеми.

Неявно-явна схема з вагами (2.19) абсолютно стійка при  $1/2 \leq \theta \leq 1$  і умовно стійка з умовою  $\sigma \leq \frac{1}{2}$  при  $0 \leq \theta \leq 1/2$ .

Таким чином, схема Кранка-Ніколсона (2.19) при  $\theta = 1/2$  абсолютно стійка і має другий порядок апроксимації за часом і просторовою змінною  $x$ .

### 2.2.1. Апроксимація граничних умов, що містять похідні

В задачах математичної фізики взагалі, і в завданнях теплопровідності зокрема, граничні умови 1-го роду апроксимуються точно в вузлах на границі розрахункової області. Граничні умови 2-го і 3-го роду відрізняються тим, що в них присутня похідна першого порядку шуканої функції по просторовій

змінній. Тому для замикаання кінцево-різнісної схеми необхідна їх апроксимація. Найпростішим варіантом є апроксимація похідних спрямованими різницями першого порядку:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{j=0}^{k+1} = \frac{u_1^{k+1} - u_0^{k+1}}{h} + O(h); \quad \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{j=N}^{k+1} = \frac{u_N^{k+1} - u_{N-1}^{k+1}}{h} + O(h). \quad (2.20)$$

Тоді в загальному випадку граничних умов 3-го роду (2.6), (2.7) рівняння, що пов'язує значення шуканої функції в двох крайніх вузлах різницевої сітки, виглядають наступним чином:

$$\alpha \frac{u_1^{k+1} - u_0^{k+1}}{h} + \beta u_0^{k+1} = \varphi_0(t^{k+1}) + O(h), \quad (2.21)$$

$$\gamma \frac{u_N^{k+1} - u_{N-1}^{k+1}}{h} + \delta u_N^{k+1} = \varphi_l(t^{k+1}) + O(h). \quad (2.22)$$

Доповнюючи отриманими рівняннями явну кінцево-різницеву апроксимацію у внутрішніх вузлах, отримаємо явну різнісну схему для третьої початково-крайової задачі (2.1), (2.3), (2.6), (2.7).

$$\alpha \frac{u_1^{k+1} - u_0^{k+1}}{h} + \beta u_0^{k+1} = \varphi_0(t^{k+1}), \quad (2.23)$$

$$\frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\tau} = \alpha^2 \frac{u_{j+1}^k - 2u_j^k + u_{j-1}^k}{h^2}, j = \overline{1, N-1}, \quad k = \overline{0, K-1}, \quad (2.24)$$

$$\gamma \frac{u_N^{k+1} - u_{N-1}^{k+1}}{h} + \delta u_N^{k+1} = \varphi_l(t^{k+1}). \quad (2.25)$$

В результаті алгоритм переходу на новий часовий шар з використанням явної схеми можна представити в наступному вигляді:

$$u_j^{k+1} = \sigma \cdot u_{j+1}^k + (1 - 2\sigma)u_j^k + \sigma \cdot u_{j-1}^k, \quad \sigma = \frac{a^2 \tau}{h^2}, j = \overline{1, N-1}, \quad (2.26)$$

$$u_0^{k+1} = -\frac{\frac{\alpha}{h}}{\beta - \frac{\alpha}{h}} u_1^{k+1} + \frac{\varphi_0(t^{k+1})}{\beta - \frac{\alpha}{h}}, \quad (2.27)$$

$$u_N^{k+1} = \frac{\frac{\gamma}{h}}{\delta + \frac{\gamma}{h}} u_{N-1}^{k+1} + \frac{\varphi_l(t^{k+1})}{\delta + \frac{\gamma}{h}}. \quad (2.28)$$

Тобто спочатку розраховуються значення шуканої функції у всіх внутрішніх вузлах на новому часовому шарі, а потім визначаються значення на границях.

При використанні неявної кінцево-різнісної схеми отримуємо наступний різнісний аналог диференціальної задачі:

$$b_0 u_0^{k+1} + c_0 u_1^{k+1} = d_0, \quad (2.29)$$

$$a_j u_{j-1}^{k+1} + b_j u_j^{k+1} + c_j u_{j+1}^{k+1} = d_j, \quad j = \overline{1, N-1}, \quad (2.30)$$

$$a_N u_{N-1}^{k+1} + b_N u_N^{k+1} = d_N, \quad (2.31)$$

де:

$$b_0 = \beta - \frac{\alpha}{h}, c_0 = \frac{\alpha}{h}, \quad d_0 = \frac{\varphi_0(t^{k+1})}{\beta - \frac{\alpha}{h}}, \quad (2.32)$$

$$a_N = -\frac{\gamma}{h}, b_N = \delta + \frac{\gamma}{h}, d_N = \frac{\varphi_l(t^{k+1})}{\delta + \frac{\gamma}{h}}, \quad (2.33)$$

$$a_j = \sigma, b_j = -(1 + 2\sigma), c_j = \sigma, d_j = -u_j^k, \quad j = \overline{1, N-1}, \quad \sigma = \frac{a^2 \tau}{h^2}. \quad (2.34)$$

В результаті для отримання рішення на новому часовому шарі  $t^{k+1}$  вирішується система лінійних алгебраїчних рівнянь з трьохдіагональною матрицею. Аналогічна картина має місце і при використанні неявно-явної схеми з вагами.

Принциповою особливістю розглянутого вище підходу є перший порядок апроксимації граничних умов. Тобто порядок апроксимації в граничних вузлах нижче порядку апроксимації у внутрішніх вузлах розрахункової області. При цьому глобальний порядок апроксимації (у всій розрахунковій області) дорівнює найменшому щодо всіх вузлів сітки порядку апроксимації [25].

Одним із способів підвищення порядку апроксимації граничних умов є використання формул чисельного диференціювання другого порядку:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0, t^{k+1}) = \frac{-3u_0^{k+1} + 4u_1^{k+1} - u_2^{k+1}}{2h} + O(h^2), \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(l, t^{k+1}) = \frac{u_{N-2}^{k+1} - 4u_{N-1}^{k+1} + 3u_N^{k+1}}{2h} + O(h^2). \quad (2.36)$$

У разі явної схеми алгоритм обчислення рішення на новому часовому шарі при такій апроксимації граничних умов не набуває принципів змін. Якщо ж використовується неявна схема, то виходить при цьому СЛАР втрачає трьохдіагональний вигляд (перше і останнє рівняння містять три невідомих). Цей недолік легко можна усунути, тому що шляхом лінійної комбінації першого рівняння з другим (останнього з передостаннім) можна домогтися

виключення третього невідомого з відповідного рівняння. Однак при цьому можливе порушення діагонального переважання матриці і, отже, порушення умов застосування методу прогонки.

Більш ефективним є підхід, що дозволяє підвищити порядок апроксимації граничних умов без збільшення числа вузлів в апроксимаційних співвідношеннях. Для ілюстрації цього підходу розглянемо наступний приклад.

### Приклад

Вирішити третю початково-крайову задачу для параболічного рівняння, що містить як конвективні члени (пропорційні похідній  $\frac{\partial u}{\partial x}$ ), так і джерельні члени, що містять шукану функцію  $u(x, t)$ :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b \frac{\partial u}{\partial x} + gu, \quad 0 < x < l, t > 0; \\ \alpha \frac{\partial u(0, t)}{\partial x} + \beta u(0, t) = \varphi_0(t), \quad x = 0, t > 0; \\ \gamma \frac{\partial u(l, t)}{\partial x} + \delta u(l, t) = \varphi_l(t), \quad x = l, t > 0; \\ u(x, 0) = \psi(x), \quad 0 \leq x \leq l, t = 0. \end{array} \right. \quad (2.37 - 2.39)$$

### Розв'язок

У внутрішніх вузлах кінцево-різнісної сітки неявна кінцево-різнісна схема для рівняння (1.33) має вигляд:

$$\frac{u_j^{k+1} - u_j^k}{\tau} = a^2 \frac{u_{j+1}^{k+1} - 2u_j^{k+1} + u_{j-1}^{k+1}}{h^2} + b \frac{u_{j+1}^{k+1} - u_{j-1}^{k+1}}{2h} + gu_j^{k+1} + O(\tau + h^2),$$

$$j = \overline{1, N-1}. \quad (2.40)$$

Якщо похідні першого порядку в граничних умовах (2.34) і (2.35) апроксимувати за наступною схемою (за допомогою відношення кінцевих різниць справа і зліва):

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{j=0}^{k+1} = \frac{u_1^{k+1} - u_0^{k+1}}{h} + O(h); \quad \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{j=N}^{k+1} = \frac{u_N^{k+1} - u_{N-1}^{k+1}}{h} + O(h), \quad (2.41)$$

то граничні умови апроксимуються з першим порядком, і глобальний порядок буде дорівнює першому порядку незважаючи на те, що у всіх інших вузлах порядок апроксимації по просторовим змінним дорівнює двом. Для збереження порядку апроксимації, рівного двом, в граничних вузлах розкладемо на точному вирішенні значення  $u_1^{k+1}$  в околі точки  $x = 0$  в ряд Тейлора по змінній  $x$  до третьої похідної включно, а  $u_{N-1}^{k+1}$  – в аналогічний ряд в околі точки  $x = l$ , одержимо (у припущенні що функція  $u(x, t)$  в граничних вузлах має перші похідні за часом і другі - по  $x$ ):

$$u_1^{k+1} = u(0 + h, t^{k+1}) = u_0^{k+1} + \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_0^{k+1} h + \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_0^{k+1} \frac{h^2}{2} + O(h^3), \quad (2.42)$$

$$u_{N-1}^{k+1} = u(l - h, t^{k+1}) = u_N^{k+1} - \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_N^{k+1} h + \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_N^{k+1} \frac{h^2}{2} + O(h^3). \quad (2.43)$$

Далі, підставимо сюди значення другої похідної в граничних вузлах, отримані з диференціального рівняння (2.33):

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{j=0,N}^{k+1} = \left( \frac{1}{a^2} \cdot \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{b}{a^2} \cdot \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{g}{a^2} u \right)_{j=0,N}^{k+1}, \quad (2.44)$$

і знайдемо з отриманих виразів (2.38), (2.39) значення першої похідної  $\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{j=0,N}^{k+1}$ ,

в граничних вузлах з порядком  $O(\tau + h^2)$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_0^{k+1} &= \frac{2a^2}{h(2a^2 - bh)} \cdot (u_1^{k+1} - u_0^{k+1}) - \frac{h}{2a^2 - bh} \cdot \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_0^{k+1} + \frac{gh}{2a^2 - bh} \\ &\quad + O_1(h^2), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_N^{k+1} &= \frac{2a^2}{h(2a^2 - bh)} \cdot (u_N^{k+1} - u_{N-1}^{k+1}) - \frac{h}{2a^2 - bh} \cdot \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_N^{k+1} - \frac{gh}{2a^2 + bh} \\ &\quad + O_2(h^2) \end{aligned}$$

Підставляючи,  $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_0^{k+1}$  в (2.34), а у  $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_N^{k+1}$  у (2.35) і апроксимуючи отримані співвідношення в відповідних граничних вузлах (при цьому  $\frac{\partial u}{\partial t} \Big|_0^{k+1} = (u_0^{k+1} - u_0^k)/\tau + O(\tau)$ ,  $\frac{\partial u}{\partial t} \Big|_N^{k+1} = (u_N^{k+1} - u_N^k)/\tau + O(\tau)$ ), отримаємо алгебраїчні рівняння для граничних вузлів, в кожному з яких два невідомих:

$$b_0 u_0^{k+1} + c_0 u_1^{k+1} = d_0, \quad j = 0; \quad (2.45)$$

$$a_0 = 0, b_0 = \frac{2a^2}{h} + \frac{h}{\tau} - gh - \frac{\beta}{\alpha}(2a^2 - bh); \quad c_0 = -\frac{2a^2}{h};$$

$$d_0 = \frac{h}{\tau} \cdot u_0^k - \varphi_0(t^{k+1}) \frac{2a^2 - bh}{\alpha};$$

$$a_N \cdot u_{N-1}^{k+1} + b_N \cdot u_N^{k+1} = d_N, \quad j = N; \quad (2.46)$$

$$a_N = -\frac{2a^2}{h}; \quad b_N = \frac{2a^2}{h} + \frac{h}{\tau} - gh + \frac{\delta}{\gamma}(2a^2 + bh); \quad c_N = 0;$$

$$d_N = \frac{h}{\tau} \cdot u_N^k + \varphi_l(t^{k+1}) \frac{2a^2 + bh}{\gamma}.$$

Таким чином, (2.45) – кінцево-різнісна апроксимація граничної умови 3-го роду (2.34) на лівій границі  $x = 0$ , а (2.46) – кінцево-різнісна апроксимація



граничної умови 3-го роду (2.35) на правій межі  $x = l$ , які зберігають той же порядок апроксимації, що і в кінцево-різнісній апроксимації (2.37) диференціального рівняння (2.33).

Приписуючи до граничних кінцево-різнісних рівнянь (2.45), (2.46), кожне з яких містить два значення сіткової функції, алгебраїчні рівняння (2.37), записані у вигляді:

$$a_j u_{j-1}^{k+1} + b_j u_j^{k+1} + c_j u_{j+1}^{k+1} = d_j, \quad j = \overline{1, N-1}; \quad (2.47)$$

$$a_j = -\left(\frac{a^2}{h^2} - \frac{b}{2h}\right); \quad b_j = \frac{2a^2}{h^2} + \frac{1}{\tau} - g; \quad c_j = -\left(\frac{a^2}{h^2} + \frac{b}{2h}\right); \quad d_j = \frac{1}{\tau} \cdot u_j^k,$$

отримаємо СЛАР з трьохдіагональною матрицею, що вирішується методом прогонки ( $a_0 = 0$ ;  $c_N = 0$ ):

$$A_j = -\frac{c_j}{b_j + a_j A_{j-1}}; \quad B_j = \frac{d_j - a_j B_{j-1}}{b_j + a_j A_{j-1}} \quad \left( A_0 = -\frac{c_0}{b_0}; \quad B_0 = \frac{d_0}{b_0}; \quad A_N = 0 \right) \\ j = \overline{0, N}; \quad (2.48)$$

$$u_j^{k+1} = A_j u_{j+1}^{k+1} + B_j; \quad (u_N^{k+1} = B_N), j = N, N-1, \dots, 0. \quad (2.49)$$

Викладений метод апроксимації крайових умов, що містять похідні по просторовим змінним, підвищує не тільки порядок апроксимації, а й зберігає консервативність кінцево-різнісної схеми, тобто в кінцево-різнісній апроксимації дотримуються закони збереження, на основі яких виведені диференціальні співвідношення задачі (2.33)-(2.34).

Аналогічний підхід можна здійснити в крайових задачах для диференціальних рівнянь будь-яких типів [22-24].

### 2.3. Рішення рівняння Шредінгера, яке залежить від часу

Еволюція квантової системи, що складається з  $N$  частинок, що рухаються зі швидкостями, які набагато менші за швидкість світла, без урахування спіну описується часовим рівнянням Шредінгера:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)}{\partial t} = \hat{H}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t). \quad (2.50)$$

де  $\hat{H}$  гамільтоніан системи (оператор повної енергії),  $\hbar$  – стала Планка,  $\psi$  – хвильова функція системи,  $|\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)|^2$  є густиною ймовірності того, що в момент часу  $t$  перша частинка буде знаходитися в точці  $\vec{r}_1$ , друга частка в  $\vec{r}_2$ , ...,  $N$ -а частинка в точці  $\vec{r}_N$ . Точне чисельне рішення такого рівняння навіть на найпотужніших сучасних комп'ютерах можливо тільки для квантових систем, що складаються з невеликого числа частинок. Для простоти будемо розглядати одновимірну квантову систему. Одновимірні задачі виходять при поділі змінних в багатовимірних рівняннях, можливі для таких завдань, як про рух в центральній-симетричному потенціалі [23].

Одновимірне часове рівняння Шредінгера в атомних одиницях виміру має вигляд:

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H}(x, t) \psi(x, t). \quad (2.51)$$

Атомні одиниці визначаються таким чином, що в них стала Планка  $\hbar$ , заряд електрона  $e$  і його маса  $m_e$  рівні одиниці. Крім рівняння руху, потрібно ще задати початковий стан системи (початкову умову):

$$\psi(x, 0) = \psi_0(x).$$

Якщо в початковий момент часу система була зв'язаною, то хвильова функція повинна задовольняти граничним умовам:

$$\psi(-\infty, t) = 0; \quad \psi(\infty, t) = 0.$$

Це рівняння параболічного типу, але з уявною одиницею, що призводить до того, що на відміну від, наприклад, рівняння нестационарної теплопровідності, рівняння Шредінгера має осцилюючі рішення.

Формально рішення (2.51) можна записати як:

$$\psi(x, t) = \exp \left[ -i \int_0^t \hat{H}(x, t') dt' \right] \psi(x, 0), \quad (2.52)$$

де множник перед  $\psi(x, 0)$  в правій частині називається оператором еволюції або пропагатор. Зауважимо, що оператор еволюції унітарний, тобто комплексно пов'язаний до нього дорівнює зворотному. Це призводить до того, що норма рішення зберігається:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1. \quad (2.53)$$

Цю умову можна розглядати як необхідну умову стійкості будь-якого наближеного методу рішення (2.51). Під стійкістю чисельного методу мається на увазі, що помилка (відхилення наближеного рішення від точного) зростає за степеневим, а не за експоненціальним законом. Щоб воно гарантовано задовольнялося, необхідно, щоб наближений оператор еволюції також був унітарним.

Необхідно підкреслити, що стійкість і точність (порядок апроксимації) – незалежні властивості чисельної схеми, і висока точність не забезпечує стійкості. Прикладом точного, але нестійкого методу є метод Рунге-Кутта високого порядку. Але стійкість схеми при вирішенні (2.51) куди більш важлива, ніж точність [22-23].

### 2.3. Метод Кранка-Ніколсона

Почнемо з того, що виберемо однорідну сітку за часом з кроком  $\tau$ . З (2.52) випливає:

$$\psi_{N+1} = \exp \left[ -i\hat{H}(t_{N+\frac{1}{2}})\tau \right] \psi_N. \quad (2.54)$$

замінили інтеграл його наближенням за допомогою формули прямокутників. Тут  $(t_N = N\tau, \psi_N = \psi(x, t_N))$ . Тепер ми повинні вибрати наближення для експоненти, оскільки безпосередньо експоненту від оператора, тобто матриці, ми підрахувати не можемо. Звичайне розкладання в ряд Тейлора не підходить, оскільки наближений оператор буде неунітарним. На практиці це буде обернутися ростом норми з часом, тобто нестійкістю.

Як наближення для експоненти виберемо дрібно-раціональну апроксимацію Паде:

$$\exp \left[ -i\hat{H}(t_{N+\frac{1}{2}})\tau \right] = \frac{I - \frac{i\tau}{2}\hat{H}(t_{N+\frac{1}{2}})}{I + \frac{i\tau}{2}\hat{H}(t_{N+\frac{1}{2}})} + O(\tau^3), \quad (2.55)$$

$I$  – одиничний оператор. Те, що це вірно, неважко перевірити за допомогою порівняння розкладів Тейлора експоненти і дробу. Унітарність дрібно-раціонального оператора очевидна. Підставляючи дробнораціональний оператор в (2.54) замість експоненти і помноживши обидві частини виразу на  $I + \frac{i\tau}{2}\hat{H}(t_{N+\frac{1}{2}})$ , отримуємо:

$$\left[ I + \frac{i\tau}{2}\hat{H}(t_{N+\frac{1}{2}}) \right] \psi_{N+1} = \left[ I - \frac{i\tau}{2}\hat{H}(t_{N+\frac{1}{2}}) \right] \psi_N. \quad (2.56)$$

Якщо гамільтониан дискретизований, тобто перетворений в матрицю, наприклад за допомогою різницевої схеми, процедура обчислення зводиться до вирішення лінійної системи рівнянь відносно вектора  $\psi_{N+1}$ . Такий метод називається схемою Кранка-Ніколсона [23].

## 2.4. Проблема нефізичного відображення

Ми можемо чисельно вирішити рівняння Шредінгера тільки на обмеженому відрізку  $x \in [a, b]$ . Це несуттєво, якщо нас цікавить тільки динаміка зв'язаних станів, оскільки завжди можна вибрати досить великий відрізок, щоб на його границях хвильові функції стаціонарних станів оберталися в нуль. Взагалі, у систем з потенціалом, який прагне до  $+\infty$  при  $x \rightarrow \pm\infty$ , немає вільних станів. Але реальних систем з таким потенціалом в атомній фізиці немає, і від атома завжди можна відірвати електрон (іонізація), а від молекули - атом (дисоціація). Вільні стани називаються станами континууму або просто континуумом, оскільки їх енергія може бути будь-якою більше нуля, на відміну від зв'язаних станів, енергія яких може приймати тільки дискретний ряд значень. Хвильові функції континууму в нуль на нескінченності не звертаються, оскільки ймовірність виявити частинку не дорівнює нулю на будь-якій відстані. Фактично, при іонізації (або дисоціації) утворюється хвильовий пакет, що складається з станів континууму з різною енергією, який розширюється з плином часу. "Фронт" цього пакета рано чи пізно дійде до границь нашої координатної решітки і відіб'ється від них. Цей чисто чисельний факт називається нефізичним відображенням і призводить до неправильних результатів розрахунків, оскільки частинка повертається назад замість того, щоб полетіти на нескінченність. Найпростішим способом боротьби з цим ефектом є віддалення границі сітки від силового центру на відстань  $\sim vT$ , де  $v$  - максимальна швидкість частинки, що може утворитися з помітною ймовірністю при досліджуваному процесі,  $T$  - час протікання процесу, наприклад тривалість лазерного імпульсу, іонізуючого атом. Такий спосіб не дуже раціональний, оскільки при цьому зі збільшенням потрібного  $T$  час роботи програми зростає квадратично, а необхідна комп'ютерна пам'ять лінійно. Але зауважимо, що далеко від центру системи відірвана частинка зазвичай рухається по досить простій траєкторії, зокрема, якщо потенціал короткодійний, то частка далеко від центру стає вільною і рухається

рівномірно і прямолінійно [26]. У квантовій механіці такий частці з енергією  $E$  відповідає відходяча плоска хвиля:

$$\psi_E(x, t) \sim e^{i(k|x| - Et)},$$

де  $k = \sqrt{2E}$  – хвильове число, в атомних одиницях рівне імпульсу. Нефізичне відображення можна подавити, формально додавши додатковий уявний потенціал поблизу границі сітки:

$$U_{abs}(x) = \begin{cases} 0, & x \in [a_1, b_1]; \\ -iu(x - b_1), & x > b_1; \\ -iu(a_1 - x), & x < a_1, \end{cases} \quad (2.57)$$

де  $a_1 > a$ ,  $b_1 < b$  – границі області розрахунку, в якій нас цікавить хвильова функція,  $u(x)$  – гладка функція, така що  $u(0) = 0$ , наприклад лінійна  $u(x) = \alpha x$ . Рівняння Шредінгера набуває вид:

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, t) + U_{abs}(x) \right] \psi(x, t). \quad (2.58)$$

Такий потенціал буде поглинати частинки, які долетіли до границі. Оскільки хвильова функція наближено буде мати вигляд:

$$\psi_E(x > b_1, t) \sim e^{i(kx - Et) - \frac{\alpha}{k}(x - b_1)^2},$$

тобто її амплітуда буде швидко зменшуватися:

$$|\psi_E(x > b_1, t)|^2 \sim e^{-\frac{2\alpha}{k}(x - b_1)^2},$$

і при правильному підборі параметрів поглинаючого потенціалу функція на границях сітки буде практично дорівнювати нулю, ми можемо використовувати граничні умови:

$$\psi(a, t) = 0; \quad \psi(b, t) = 0.$$

Зауважимо, що подавлення за допомогою добавки уявного потенціалу неефективно для частинок з великою енергією. Коли наявність частинок

великої енергії істотна, краще використовувати так званий зовнішній комплексний скейлінг [28], що полягає в повороті просторової координати в комплексну площину:

$$z = \begin{cases} x, & x \in [a_1, b_1]; \\ b_1 + e^{i\theta}(x - b_1), & x > b_1; \\ a_1 + e^{i\theta}(x - a_1), & x < a_1, \end{cases} \quad (2.59)$$

де кут повороту в комплексну площину  $0 < \theta < \pi/2$ . Рівняння Шредінгера набуває вигляду:

$$i \frac{\partial \psi(z, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U(z, t) \right] \psi(z, t). \quad (2.60)$$

Тоді

$$|\psi_E(z(x > b_1), t)|^2 \sim e^{-2k(x-b_1) \sin \theta}.$$

тобто найбільш сильно подавляються стани, що відповідні високоенергетичним частинкам, які як раз швидше за все досягають границі.

Зауважимо, що при використанні як методу, що поглинає потенціал, так і при комплексному скейлінгу норма хвильової функції перестає зберігатися (зменшуватися), оскільки частинки йдуть з області, в якій ведуться обчислення.

## 2.5. Еволюційні задачі, нелінійні по хвильовій функції

Рівняння Шредінгера лінійне по хвильовій функції, але для систем з великого числа взаємодіючих частинок, що не допускають відокремлення змінних, його неможливо чисельно вирішити. Тому при вирішенні таких задач використовується різні наближення, засновані на припущенні, що частинка рухається в якомусь усередненому потенціалі, створюваному іншими частинками. Такий потенціал може підбиратися емпірично, як робиться в

ядерній фізиці, або розраховується як середнє від потенціалу по хвильовим функціям інших частинок (наближення Хартрі-Фока). Такий підхід дозволяє розділити змінні, але призводить до рівнянь, нелінійних по хвильовій функції. Ми обмежимося розглядом методів вирішення нестационарного рівняння Гросса-Пітаєвський, що описує динаміку Бозе-конденсату нейтральних атомів [9]:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_a} \nabla^2 + U(\vec{r}, t) + g|\psi(\vec{r}, t)|^2 \right] \psi(\vec{r}, t). \quad (2.61)$$

Тут  $\psi(\vec{r}, t)$  – середня хвильова функція атома конденсату,  $U(\vec{r}, t)$  – потенціал електромагнітної пастки, що утримує хмара атомів,  $g = 4\pi\hbar a_s/m_a$  – параметр зв'язку,  $a_s$  – довжина розсіювання, що описує взаємодію між атомами при парних зіткненнях,  $a_s > 0$  якщо атоми відштовхуються і  $a_s < 0$  якщо притягуються,  $m_a$  – маса атому,  $N$  – число атомів в пастці. Зауважимо, що величина  $m_a N |\psi(\vec{r}, t)|^2$  має простий фізичний зміст – це густина газу в даній точці.

В оптиці рівнянням типу (2.61), тільки з двома, а не з трьома просторовими змінними, описується поширення лазерного пучка через світловод з нелінійним коефіцієнтом заломлення. Ми будемо розглядати випадок одновимірного конденсату, знову таки в наведених одиницях:

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, t) + g|\psi(x, t)|^2 \right] \psi(x, t). \quad (2.62)$$

Фізично це ситуація сильно витягнутого уздовж одного виміру хмари атомів, що досить часто зустрічається в експериментах [28].

При еволюції зберігається норма (2.61), що відповідає збереженню числа атомів. Крім того, зберігається повна енергія:



$$E = \langle \hat{H} \rangle = \int \psi^*(x, t) \hat{H} \psi(x, t) dx, \quad (2.63)$$

де гамільтоніан:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, t) + \frac{g}{2} |\psi(x, t)|^2,$$

третій доданок тут енергія, що виникає внаслідок звичайного газового тиску, а перший - енергія так званого квантового тиску. Зауважимо, що член в квадратних дужках в правій частині рівняння (2.62):

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, t) + g |\psi(x, t)|^2, \quad (2.64)$$

відрізняється від гамільтоніана множником перед нелінійним доданком.

Через наявність нелінійного доданку використання неявних схем типу методу Кранка-Ніколсона на пряму неможливо.

## 2.6. Метод розщеплення

Для вирішення еволюційних рівнянь з нелінійністю, а також для рівнянь з гамільтоніаном, які представлені у вигляді суми операторів, для кожного з яких вирішити неявне рівняння легко, а разом - складно (наприклад, багатовимірних), зручно користуватися методом розщеплення. Він базується на можливості представити експоненту від суми операторів у вигляді добутку:

$$e^{\tau(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\tau\hat{A}} e^{\tau\hat{B}} e^{\frac{\tau^2}{2}[\hat{A},\hat{B}]} + O\left(\tau^3 [\hat{A} + \hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]]\right). \quad (2.65)$$

Зауважимо, що якщо оператори  $\hat{A}$  і  $\hat{B}$  комутують, експонента суми дорівнює добутку експонент, як для звичайних чисел.

Якщо ми представимо оператор (2.64) у вигляді суми:

$$\widehat{\mathcal{H}} = \widehat{H}_0 + V,$$

де лінійний гамільтоніан:

$$\widehat{H}_0 = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, t),$$

і нелінійний потенціал

$$V = g|\psi(x, t)|^2,$$

то ми можемо представити еволюційний оператор у вигляді добутку (2.65). Але в цьому добутку присутня експонента від комутатора, яку обчислити проблематично, і при нехтуванні якої ми отримаємо схему з точністю порядку  $O(\tau)$ , що не дуже добре. Для того щоб отримати формулу другого порядку без комутатора, застосуємо (2.65) двічі – спочатку в прямому, а потім у зворотному порядку:

$$e^{2\tau(\widehat{A}+\widehat{B})} = e^{\tau\widehat{A}}e^{\tau\widehat{B}}e^{\tau\widehat{B}}e^{\tau\widehat{A}} + O\left(\tau^3\left[\widehat{A} + \widehat{B}, [\widehat{A}, \widehat{B}]\right]\right).$$

Тепер ми можемо представити пропагатор у вигляді:

$$\exp[-i(\widehat{H}_0 + \widehat{V})\tau] = \exp\left[-\frac{i\tau}{2}\widehat{H}_0\right]\exp(-i\tau V)\exp\left[-\frac{i\tau}{2}\widehat{H}_0\right] + O(\tau^3). \quad (2.66)$$

що якщо скористатися сітковим методом, то множник з нелінійним потенціалом вдає із себе просто експоненту від числа, яку обчислити неважко. Шари з лінійним оператором можна апроксимувати розкладанням Паде, що дасть на кожному з цих шарів схему Кранка-Ніколсона. Те що вийде в результаті, у вітчизняній літературі називається методом двуциклічного розщеплення [29], а в іноземній – split operator method. Остаточну схему можна записати у вигляді:

$$\left[I + \frac{i\tau}{4}\widehat{H}\left(t_{N+\frac{1}{2}}\right)\right]\psi_{N+\frac{1}{2}} = \left[I - \frac{i\tau}{4}\widehat{H}\left(t_{N+\frac{1}{2}}\right)\right]\psi_N; \quad (2.67)$$

$$\tilde{\psi}_{N+\frac{1}{2}} = \frac{1 - \frac{i\tau}{2} g \left| \psi_{N+\frac{1}{2}} \right|^2}{1 + \frac{i\tau}{2} g \left| \psi_{N+\frac{1}{2}} \right|^2} \psi_{N+\frac{1}{2}} \quad (2.68)$$

$$\left[ I + \frac{i\tau}{4} \widehat{H} \left( t_{N+\frac{1}{2}} \right) \right] \psi_{N+1} = \left[ I - \frac{i\tau}{4} \widehat{H} \left( t_{N+\frac{1}{2}} \right) \right] \tilde{\psi}_{N+\frac{1}{2}}; \quad (2.69)$$

Зауважимо, що величини, що позначаються в схемі  $\psi_N, \psi_{N+1/2}, \tilde{\psi}_{N+1/2}$  і  $\psi_{N+1}$ , при реалізації схеми у вигляді програми представляються одним і тим же масивом, тільки змінному на кожному кроці.

Метод розщеплення умовно стійкий, тобто стійкий тільки при виконанні умови:

$$\tau < \frac{1}{\max(g \|\psi\|^2, \|\widehat{H}_0\|)}, \quad (2.70)$$

де під  $\|\psi\| = \max_{x \in [a,b]} |\psi(x)|$  – чебишевська норма, тобто максимальне по модулю значення функції, а  $\|\widehat{H}_0\|$  дорівнює максимальному по модулю власному значенню оператора  $\widehat{H}_0$ . Для різнісної схеми  $\|\widehat{H}_0\| \simeq 2/h^2$  і при не дуже великих  $g$  має бути:

$$\tau < \frac{h^2}{2}. \quad (2.71)$$

## ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 2

З цього розділу випливає, що розглянутий метод кінцевих різниць є одним з найбільш поширених чисельних методів розв'язання рівнянь з частинними похідними (рівнянь математичної фізики).

На відміну від стаціонарних задач і завдань молекулярної динаміки, для чисельного розрахунку нестаціонарних процесів немає стандартних програмних комплексів, і програми зазвичай або створюються під конкретну задачу, або їх доводиться істотно модифікувати при застосуванні до нової проблеми. Тому за допомогою методу кінцевих різниць можна істотно підвищити точність розв'язку таких задач.

## РОЗДІЛ 3. ЧИСЕЛЬНИЙ РОЗВ'ЯЗОК РІВНЯННЯ ДЛЯ АКСІОНІВ

В цьому розділі представлений опис алгоритму чисельного розв'язку задачі для однокомпонентного випадку, двокомпонентного та випадку де присутні аксіони та баріонна речовина.

### 3.1. Онокомпонентний випадок

#### 3.1.1. Нелінійне інтегрально-диференціальне рівняння Шредінгера та його основний стан

##### N-компонентне рівняння Шредінгера

Почнемо з нерелятивістського рівняння Шредінгера:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t)}{\partial t} = H_N \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t), \quad (3.1)$$

для  $N$ -гравітаційно взаємодіючих аксіонів, описаних Гамільтоніаном:

$$H_N = -(\hbar^2/2m) \sum_{i=1}^N \Delta_{\vec{r}_i} - Gm^2 \sum_{i < j=1}^N \left( \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right), \quad (3.2)$$

де  $m$ ,  $\vec{r}_i$ ,  $G$  - маса аксіонів, координата та гравітаційна константа, відповідно.

Введемо безрозмірні змінні:

$$\vec{x}_i = \frac{\vec{r}_i}{r_0}, \tau = (\hbar/mr_0^2)t. \quad (3.3)$$

Тоді, безрозмірне рівняння Шредінгера стає:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N; \tau)}{\partial \tau} = H_N \psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N; \tau), \quad (3.4)$$

де безрозмірний гамільтоніан приймає форму:

$$H_N \equiv \left(\frac{mr_0^2}{\hbar}\right) H_N = -\left(\frac{1}{2}\right) \sum_{i=1}^N \Delta_{\vec{x}_i} - \frac{1}{N} \sum_{i < j=1}^N \left(\frac{1}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|}\right), \quad (3.5)$$

Перепишемо  $r_0$ :

$$r_0 = \left(\frac{\hbar^2}{Gm^2M}\right), \text{ де } M = mN. \quad (3.6)$$

### Наближення середнього поля

Безрозмірний гамільтоніан  $H_N$ , збігається з безрозмірним гамільтоніаном,  $H_N$  в роботі [30], де було показано, що може бути використане наближення середнього поля (MF), коли  $N \rightarrow \infty$ . Для  $N$  взаємодіючих аксіонів можна вважати  $N$  дуже великим і  $M = mN$  фіксованим (так як маса аксіонів крихітна). У наближенні середнього поля розглядається початковий розплутаний стан  $N$  однакових частинок, причому:

$$\psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N; 0) = \psi(\vec{x}_1, 0) \otimes \dots \otimes \psi(\vec{x}_N, 0). \quad (3.7)$$

Це показано в роботі [10], що для будь-яких фіксованих  $\tau$  і  $N \rightarrow \infty$ , хвильова функція:

$$\psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N; \tau) = \psi(\vec{x}_1, \tau) \otimes \dots \otimes \psi(\vec{x}_N, \tau). \quad (3.8)$$

Рівняння для однокомпонентної хвильової функції  $\psi(\vec{r}, t)$ , повернене до розмірних змінних, стає нелінійним інтегро-диференціальне рівнянням:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} - GmM \int \frac{|\psi(\vec{r}', t)|^2 d^3\vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right) \psi(\vec{r}, t). \quad (3.9)$$

Відповідна задача на власне значення в наближенні середнього поля може бути сформульована так, будемо вважати, що всі аксіони знаходяться в

одному і тому ж сферично симетричному основному стані, який описується реальною хвильовою функцією  $\psi(r)$ . Хвильова функція задовольняє нелінійному стаціонарному рівнянню Шредінгера:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\vec{r}} + mV(\vec{r}) \right) \psi = E\psi, \quad (3.10)$$

де  $m$  - маса аксіонів, а  $V(\vec{r})$  - гравітаційний потенціал, вироблений усіма аксіонами галактики:

$$V(\vec{r}) = -GM \int \frac{|\psi(r', t)|^2 d^3\vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \quad (3.11)$$

де  $M$  - загальна маса аксіонів (будемо вважати, що маса баріонної матерії набагато менша, ніж  $M$ , і її можна ігнорувати в першому наближенні).

Аналогічно вводяться такі натуральні параметри:

- Характерний розмір,  $r_0 = \left( \frac{\hbar^2}{Gm^2M} \right)$ ,
- Безрозмірна координата,  $\vec{x} = \frac{\vec{r}}{r_0}$ ,
- Безрозмірний час,  $\tau = \frac{\hbar^2}{mr_0^2} t$
- Безрозмірна хвильова функція,  $\varphi(x) = r_0^{3/2} \psi(r)$
- Безрозмірна енергія,  $\mathcal{E} = \frac{mr_0^2}{\hbar^2} E$

Тепер ми отримаємо безрозмірне рівняння:

$$-\left\{ \frac{1}{2} \Delta_{\vec{x}} + \int d\vec{x}' \frac{\varphi^2(x')}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \varphi(x) \right\} = \mathcal{E} \varphi(x). \quad (3.12)$$

Інтегруючи по полярному і азимутальному кутах і враховуючи це,

$$\int_0^\pi d\theta \frac{\sin \theta}{\sqrt{x^2 - 2xx' \cos \theta + x'^2}} = \begin{cases} \frac{2}{x}, & x > x' \\ \frac{2}{x'}, & x < x' \end{cases} \quad (3.13)$$

ми отримуємо інтегро-диференціальне рівняння типу Хартрі-Фока,

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (x\phi(x)) - \frac{4\pi}{x} \phi(x) \int_0^x x'^2 \phi^2(x') dx' - \\
& -4\pi \phi(x') \int_x^\infty x' \phi^2(x') dx' = \varepsilon \phi(x').
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Крім того, додаємо дві стандартні умови,

$$\begin{aligned}
& \phi(x = \infty) = 0 \\
& 4\pi \int_0^\infty x^2 \phi^2(x) dx = 1.
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Використовуючи підстановку

$$\varphi(x) = \sqrt{4\pi x} \phi(x), \tag{3.16}$$

отримуємо такі рівняння:

$$\varepsilon \varphi(x) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + U(x) \varphi(x), \tag{3.17}$$

$$U(x) = -\frac{1}{x} \int_0^x \varphi^2(s) ds - \int_x^\infty \frac{\varphi^2(s)}{s} ds, \tag{3.18}$$

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \int_0^\infty \left( \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} \right)^2 dx + \int_0^\infty U(x) \varphi^2(x) dx, \tag{3.19}$$

$$\varphi(0) = \varphi(\infty) = 0, \tag{3.20}$$

$$\int_0^\infty \varphi^2(x) dx = 1. \tag{3.21}$$



### 3.1.2. Числовий розв'язок

Було розроблено ефективний комп'ютерний алгоритм, який можна використовувати для вирішення рівнянь (3.17-3.21) та інших подібних задач. Рішення було знайдене на основі дискретної ітераційної процедури, яка є належним "дисипативним протоколом" (DP) ефективного динамічного рівняння Шредінгера:

$$i \frac{\partial \varphi(x, \tau)}{\partial \tau} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varphi(x, \tau)}{\partial x^2} + [U(x) - \varepsilon] \varphi(x, \tau). \quad (3.22)$$

Числове рішення рівняння (3.22) визначається в деякій кінцевій області,  $|x| \leq R$ . Граничні значення  $R$  обираємо із того, щоб формально його можна було ототожнювати з нескінченністю і використовувати граничні умови  $\varphi(x = R, \tau) = 0$ . В даному випадку  $0 \leq x \leq R$ , така що:  $\varphi(x = 0, \tau) = \varphi(x = R, \tau) = 0$ . Важливо зазначити, що для даної початкової умови,  $\varphi(x, \tau = 0)$ , ми не шукаємо точне числове рішення, що базується, наприклад, за відомим методом кінцевих різниць Кранка-Ніколсона [31], який є методом другого порядку у часі та просторі (у цьому випадку похибки схеми кінцевих різниць лівої частини  $\sim (\Delta \tau)^2$ , а для правої частини -  $\sim (\Delta x)^2$ , де  $\Delta \tau$  і  $\Delta x$  - кроки дискретизації відповідно у часі та просторі.).

Застосовуємо неявний скінченно різнісний метод першого порядку в часі:

$$i \frac{\varphi_i^{j+1} - \varphi_i^j}{\Delta \tau} = -\frac{1}{2} \frac{\varphi_{i+1}^{j+1} - 2\varphi_i^{j+1} + \varphi_{i-1}^{j+1}}{(\Delta x)^2} + [U(x_i) - \varepsilon] \varphi_i^{j+1}, \quad (3.23)$$

де  $\varphi_i^j \equiv \varphi(x_i, \tau_j)$ , яка являється дисипативною.

Як показано нижче, схема (3.23) зазвичай не зберігає ймовірність,  $\int_0^R \varphi^2(x, \tau) dx$ . Однак це цінна перевага, як порівняно з консервативним

методом Кранка-Ніколсона, оскільки на основі різнісної схеми (3.23) може бути побудований ітераційний алгоритм, щоб досягти стаціонарного стану для рівняння (9),  $\partial\varphi(x, \tau) / \partial\tau = 0$ , або, інакше кажучи, отримати рішення задачі на власне значення (3.17-3.21).

Суть цієї переваги в наступному. Річ у тім, що для заданого потенціалу  $U(x)$  та енергії,  $\varepsilon$ , процедура (3.23) виявляє властивості "фільтра" в динаміці довільної початкової умови  $\varphi(x, \tau = 0)$ .

Дійсно, розкладаючи початкову умову на власні функції  $\varphi_{k(x)}$ , оператор,  $\hat{H} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$ , отримаємо:

$$\varphi(x, \tau = 0) = \sum_k c_k \phi_k(x). \quad (3.24)$$

Тоді точне рішення рівняння (3.22) є таким:

$$\varphi(x, \tau) = \sum_k c_k \exp(i\omega_k \tau) \phi_k(x), \quad (3.25)$$

що призводить до реальних частот  $\omega_k = \varepsilon - \varepsilon_k \equiv \Delta\varepsilon_k$  і  $\varepsilon_k$  - власне значення оператора  $\hat{H}$ . Однак, слідуючи за різнісною схемою (3.23), то для кожного доданку ряду (3.25) отримуємо співвідношення для визначення частоти,  $\omega_k$ :

$$i\phi_{k,i} \frac{e^{i\omega_k(\tau+\Delta\tau)} - e^{i\omega_k\tau}}{\Delta\tau} = (\varepsilon_k - \varepsilon)\phi_{k,i}e^{i\omega_k(\tau+\Delta\tau)}, \quad (3.26)$$

отримуємо інше співвідношення для визначення частоти,  $\omega_k$ :

$$\omega_k \approx \Delta\varepsilon_k + i \frac{(\Delta\varepsilon_k)^2 \Delta\tau}{2}, \quad \Delta\varepsilon_k = \varepsilon - \varepsilon_k. \quad (3.27)$$

Тобто, замість незатухаючого по часу рішення, ми отримуємо "фільтр",

$$\varphi(x, \tau) = \sum_k c_k e^{i\Delta\varepsilon_k \tau} e^{-\gamma_k \tau} \phi_k(x), \quad \gamma_k = \frac{(\Delta\varepsilon_k)^2 \Delta\tau}{2}, \quad (3.28)$$

що витягує з усього набору власних функцій  $\{\phi_k(x)\}$  моди з найнижчими значеннями  $|\Delta\varepsilon_k|$ .

Таким чином, якщо при заданому потенціалі  $U(x)$  відоме власне значення енергії  $\varepsilon_m$ , тоді існує схема (10), яка лише імітує рішення рівняння (9), при  $\varepsilon = \varepsilon_k$ , перетворюючи з часом довільну початкову функцію  $\varphi(x, \tau = 0)$  у хвильову функцію стаціонарного стану:

$$\frac{\partial \varphi(x, \tau)}{\partial \tau} = 0, \quad \varphi(x, \tau) = f(x) e^{i\beta}, \quad (3.29)$$

де  $\beta$  – деяка установлена фаза, не залежить від  $x$ , або від функції  $\text{Re}[\varphi(x, \tau)]$  або  $\text{Im}[\varphi(x, \tau)]$  можна ототожнити з власною функцією,  $\varphi_m(x)$ , як ніби вона спочатку невідома.

**Зауваження.** Пошук рішення рівняння (3.22) у вигляді ряду (3.28) приводить до схеми Кранка-Ніколсона до рівняння виду (3.26) із заміною його правої частини на величину

$$(\varepsilon_k - \varepsilon) \phi_{k,i} e^{i\omega_k(\tau + \Delta\tau)} + \frac{e^{i\omega_k \tau}}{2}.$$

В результаті частоту  $\omega_k$  визначає рівняння  $\frac{2}{\Delta\tau} \text{tg}\left(\frac{\omega_k \Delta\tau}{2}\right) = \Delta\varepsilon_k$ , звідки  $\omega_k \approx \Delta\varepsilon_k - \Delta\varepsilon_k^3 \Delta\tau^2 / 4$ .

Тобто, схема Кранка-Ніколсона доволі точно вирішує рівняння (3.22), але є марною для знаходження рішень рівняння:

$$\varepsilon \varphi(x) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + U(x) \varphi(x), \quad (3.30)$$

оскільки не володіє властивостями фільтра, які притаманні менш точній схемі (3.23).

Різнісна схема (3.23) призводить до надійного вирішення рівняння (3.30) при заданому потенціалі  $U(x)$ . Для визначення визначення енергій  $\varepsilon_k$  ( $k = 1, 2, 3 \dots$ ) і власних хвильових функцій  $\phi_k(x)$  дискретного спектру системи задаємо на основі якісних міркувань пробну функцію  $\varphi(x, \tau = 0)$  і пробне значення енергії системи  $\varepsilon$ . Крок за часом,  $\Delta\tau$ , визначає «смугу пропускання»,  $\Delta\varepsilon_k$ , фільтра (3.28);  $\Delta\varepsilon_k \sim \sqrt{(2/\Delta\tau)}$ . Далі прямуємо за таким алгоритмом. З заданим кроком за часом,  $\Delta\tau$ , робимо розрахунок 200-500 кроків за часом (здійснюємо т.зв. «великий цикл»). При цьому пробна (початкова) хвильова функція модифікується відповідно до рівняння (3.15). Відфільтровану таким чином початкову функцію використовуємо для перерахунку (уточнення) енергії системи,  $\varepsilon$ . Перерахунок енергії проводимо або за реальною частиною,  $Re(\varphi)$ :

$$\varepsilon = \int Re(\varphi) \hat{H} Re(\varphi) dx / \int Re^2(\varphi) dx, \quad (3.31)$$

або за уявною,  $Im(\varphi)$ , припускаючи, що досягнутий стаціонарний стан, в якому  $tg\beta = Im[\varphi(x)]/Re[\varphi(x)] = const$ . Потім робимо черговий великий цикл з наступним перерахунком енергії. В результаті серії таких циклів стаціонарний стан дійсно досягається, що чітко проявляється в насиченні послідовності наближених значень  $\varepsilon$  ( $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_k$ ) і величини інтеграла  $\int Re^2(\varphi) dx$  ( $Re[\varphi(x)] \rightarrow \phi_k(x)$ ). Заздалегідь важко передбачити точно, для якого рівня,  $k$ , буде знайдена хвильова функція,  $\phi_k(x)$ , і власне значення  $\varepsilon_k$ , але сам індекс,  $k$ , визначається числом нулів  $\phi_i(x)$ . Знаходження інших рівнів енергії легко виконати варіацією пробних значень енергії системи,  $\varepsilon$ , і смуги пропускання,  $\Delta\varepsilon_k \sim \sqrt{(2/\Delta\tau)}$ , що може бути автоматизовано комп'ютерним кодом.

Рішення задачі в повній її постановці (з нелінійним потенціалом  $U(x)$  (3.22)) принципово не відрізняється від випадку заданого потенціалу  $U(x)$ . Просто після кожного великого циклу слід перераховувати не тільки енергію системи,  $\varepsilon$ , а й сам потенціал  $U(\varphi(x))$ , попередньо нормований функцію  $Re(\varphi(x))$ . Проблема вибору потенціалу для першого великого циклу легко вирішується використанням додаткового опорного потенціалу,  $U_0(x)$ , в рівнянні (9):

$$i \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi + [\gamma U_0(x) + \alpha U(\varphi(x)) - \varepsilon] \varphi, \quad (3.32)$$

де  $\alpha, \gamma$  - вагові коефіцієнти, що поступово змінюються в часі. При  $\tau = 0$ ,  $\gamma = 1$ ,  $\alpha = 0$ . Для цих параметрів після серії великих циклів виходимо на стаціонарний стан по ітераційній процедурі (3.23). Потім, по завершенні чергового великого циклу, змінюємо величини  $\gamma$  і  $\alpha$ , знижуючи малими послідовними стрибками перший з них до 0, а другий підвищуємо до 1. Завершуємо обчислення при надійному досягненні стаціонарного стану при  $\gamma = 0$ ,  $\alpha = 1$ . Описана процедура дуже корисна у випадках «дрібного» і спочатку невідомого нелінійного потенціалу  $U(\varphi(x))$ , коли невдалий вибір пробних величин може не забезпечити збіжність ітерацій до фізично правильного результату. В обговорюваному ж варіанті використання додаткового потенціалу,  $U_0(x)$ , для кожної нової пари значень параметрів  $\gamma$  і  $\alpha$  ми маємо в своєму розпорядженні достатньо хороше початкове наближення,  $\varepsilon$ ,  $\varphi(x)$ ,  $U(\varphi(x))$ , отримане на попередньому етапі обчислювальної процедури. У нашій задачі потенціал виявився дійсно дрібним. Знайти вдалося тільки основний стан. Шукана хвильова функція для вихідної задачі:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} Re[\varphi(x)] \frac{1}{x} \left( \int Re^2(\varphi(x)) dx \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (3.33)$$

### Технічні деталі розрахунку

Пробне значення енергії  $\varepsilon = -20$ , пробна хвильова функція  $\varphi(x, \tau = 0) = xe^{-x^2}$ , пробний потенціал  $U_0(x) = -50e^{-x^2/0.25}$ ,  $\Delta\tau = 0.2$ , число кроків по часу у великому циклі - 500.

Зона розрахунку  $0 \leq x \leq 25$ , число інтервалів різнисної сітки по координаті  $x$  дорівнює 20000. Вихід на стаціонар (стадія (В) тільки з пробним потенціалом,  $\gamma = 1$ ,  $\alpha = 0$ ) за 5 великих циклів;  $\varepsilon = -27.067$ . Надійний стаціонар для повного рішення задачі досягається за 200 великих циклів. Результати нижче. Помірні варіації пробних величин не позначаються на кінцевому результаті.

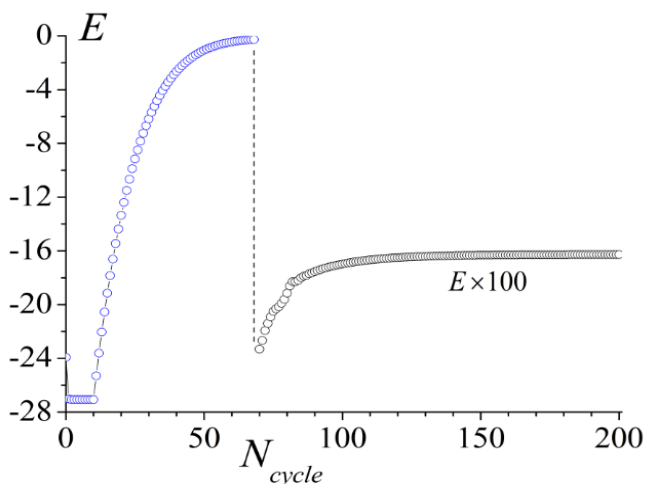


Рисунок 3.1 – показана зміна енергії системи при виконанні ітераційної процедури,  $N_{cycle}$  - номер великого циклу. На заключній стадії ( $N_{cycle} > 70$ ) енергія системи помножена на 100, щоб можна було відстежити її зміну.

Енергія основного стану  $\varepsilon_0 = -0.16277$ .

Властивості фільтрації (див. Рівняння (3.28)) схеми (3.23) можна використовувати як основу для алгоритмів різного призначення. Наприклад, задача (3.17-3.21) вирішується за допомогою наступної простої ітераційної процедури. Визначте з фізичних міркувань початкову / пробну "власну функцію",  $\varphi(x, \tau = 0)$ , енергію,  $\varepsilon^{(0)}$  та оцініть відповідний потенціал  $U^{(0)}(x)$ , використовуючи співвідношення (8). Відповідно до схеми (10), обчислити  $n$

часових кроків, щоб  $\Delta\tau \times (n\Delta\tau) \gg 1$  (див. Рівняння (3.28)). Потім перерахуйте значення ітерації  $U^{(1)}(x)$  та  $\varepsilon^{(1)}$ , використовуючи в (3.28) поточну нормовану функцію  $abs[\varphi^{(1)}(x, n\Delta\tau)]$  так, ніби це справжня власна функція, і запустіть наступну серію  $n$  часових кроки. Запустивши  $N$  таких послідовних циклів, ми отримуємо не збіжну послідовність не тільки для енергії  $\varepsilon^{(N)}$ , але і для функції  $[\varphi^{(N)}(x, N \times n\Delta\tau)]$  також. Як приклад, для пробної хвильової функції  $\varphi(x, \tau = 0) = xe^{-x^2}$ ,  $0 \leq x \leq 40$ ,  $\varepsilon^{(0)} = 0$ ,  $\Delta\tau = 0.5$ ,  $n = 500$ , стійкий стаціонарний основний стан  $\varphi(x) = abs[\varphi^{(N)}(x)]/(\sqrt{4\pi}x)$  досягається за  $N = 20$  великих циклів:  $\varepsilon_0 \approx -0.1628$ .

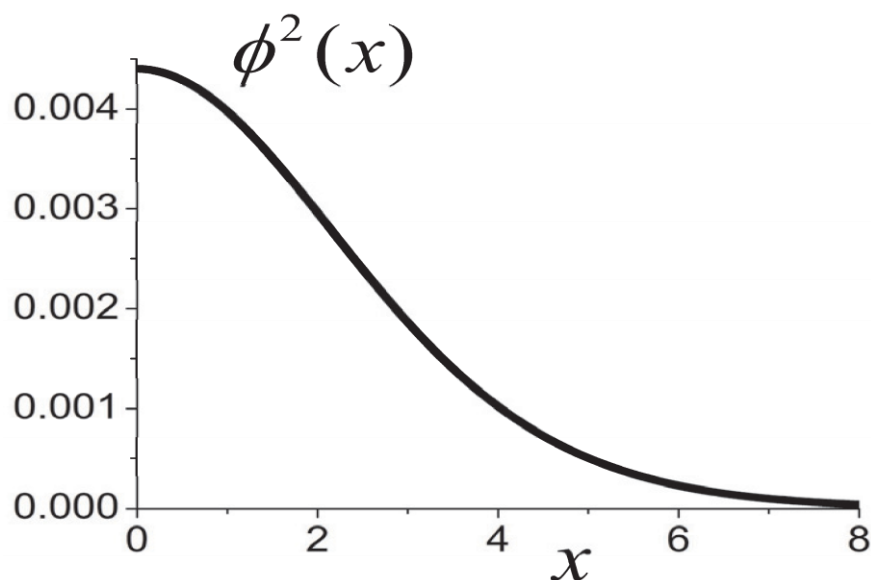


Рисунок 3.2 – густина ймовірності,  $\phi^2(x)$ .

Затухання членів розкладу у формулі (3.28) відбувається з декрементом  $\gamma_k$ . Для ефективною збіжності ітерацій значення  $\gamma_k t$  повинне бути великим,  $\gamma_k t \gg 1$  ( $t = n\Delta\tau$ ), що для малого  $\Delta\varepsilon_k$  вимагає виконання умови  $\Delta\tau(n\Delta\tau) \gg 1$ . Однак занадто великі значення  $n$  призводять до сильного затухання хвильової функції та втрати точності обчислень, оскільки кількість бітів, що представляють числа в пам'яті комп'ютера, обмежена. Наше рішення – це те саме, що отримали в роботі [8], де автори розв'язували зв'язану систему

рівнянь Шредінгера та Пуассона. Таким чином, обчислення представлено в цій роботі підтверджує результат отриманий в роботі [8].

На рис. 3.2 зображено густину ймовірності  $\varphi^2(x)$ . Видно, що “діаметр функції”,  $\varphi^2(x)$ , становить приблизно 16. Отже, припускаємо, що діаметр,  $D$ , галактичного ореолу,  $D \approx 16\rho_0$ . Беручи типовий діаметр,  $D$  і масу сферичного ореолу,  $M$ , як у роботи [2],  $D = 300 \text{ кпк}$  і  $M = 1,8 \cdot 10^{12} M_\odot$ , ми отримуємо оцінку для маси аксіонів,  $M$ , наступним чином:

$$m = \frac{\hbar}{\sqrt{r_0 GM}} \sim 1.6 \times 10^{-25} \text{ eV}. \quad (3.34)$$

Ця оцінка співвідноситься з чинними гіпотезами [4, 32, 33], припускаючи, що частинки ТМ є надлегкими аксіонами. Значення маси аксіона в цій роботі більше за значення,  $m \sim 1.6 \times 10^{-26} \text{ eV}$ , оцінене в посиланнях [32], але менше ніж  $m \sim 1.6 \times 10^{-22} \text{ eV}$ , розраховане в посиланнях [4] і [33]. Тут слід зазначити, що останні спостереження обмежують значення маси аксіонів ТМ [34–39]. Зокрема, дані, отримані у роботах [34–38], виключають аксіони з маса порядку  $10^{-25} \text{ eV}$  як кандидати ТМ. Однак вважається, що ТМ не повинна бути унікальною однокомпонентною речовиною в цілому Всесвіт. Вміст ТМ може бути різним у галактиках різного типу або навіть у галактиках одного типу. Таким чином, не повинна виключатися можливість того, що деякі спіральні галактики мають ореол ТМ, що складається з аксіонів масою, оціненою в цій роботі.

Припускається, що ореол ТМ деяких спіральних галактик може складатися з надлегких самогравітуючих аксіонів в основному стані ВЕК. Було розроблено ефективний "дисипативний" чисельний алгоритм обчислення основного стану для нелінійного інтегро-диференціального рівняння Шредінгера. Також було оцінено масу надлегкого аксіона,  $m \sim 1.6 \times 10^{-25} \text{ eV}$ , що можна порівняти з багатьма іншими припущеннями.



### 3.2. Двокомпонентний випадок

Тепер розглянемо двокомпонентний ореол темної речовини (DMH) галактики, що містить ультралегкі аксіони (ULA) різної маси. DMH описується як конденсат Боза-Ейнштейна (BEC) у своєму основному стані. У межах середнього поля (MF) отримали інтегро-диференціальні рівняння для сферично симетричних хвильових функцій двох компонентів DMH. На основі запропонованого алгоритму припускаємо, що кожен компонент можна охарактеризувати як основний стан конденсату Бозе-Ейнштейна (BEC).

Для двокомпонентної квантової системи нерелятивістських гравітаційно взаємодіючих аксіонів, виведені сполучені нелінійні інтегро-диференціальні рівняння типу Хартрі-Фока, для одночастинкових хвильових функцій,  $\phi_{1,2}(\vec{x}, t)$ , у наближенні середнього поля:  $N_{1,2} \rightarrow \infty$ ,  $M_{1,2} = m_{1,2}N_{1,2} = \text{const}_{1,2}$ , де  $N_{1,2}$ ,  $m_{1,2}$ ,  $M_{1,2}$  – кількість аксіонів, індивідуальна маса аксіону та загальна аксіонічна маса відповідного компонента,  $\vec{x} = \vec{r}/r_0$ ,  $r_0$  – є характерною просторовою шкалою системи. Показано, що ефективні потенціали включають два незалежні безрозмірні параметри,  $\alpha = (m_2/m_1)^2$  і  $\beta = M_2/M_1$ . Розроблено числовий алгоритм знаходження сферично симетричного основного стану BEC,  $\phi_{1,2}(x)$ , де  $x = |\vec{r}/r_0|$ .

Функція густини окремих частинок,  $p_{1,2}(x) = |\phi_{1,2}|^2$  та функція розподілу аксіонічної маси в ореолі,  $P(x) = (M_1/M)p_1(x) + (M_2/M)p_2(x)$ , обчислюються чисельно, де  $M_1 + M_2 = M$ .

Введено параметр,  $\hat{\chi}$ , який дозволяє відрізнити поведінку  $P(x)$  для двокомпонентної аксіонічної системи від поведінки однокомпонентної аксіонічної системи.

### 3.2.1. Нелінійні інтегрально-диференціальні рівняння для двокомпонентної DMH

Почнемо з нерелятивістського рівняння Шредінгера,

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_1}; \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_2}; t)}{\partial t} = H_{N_1, N_2} \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_1}; \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N_2}; t), \quad (3.35)$$

для  $N_1 + N_1$  гравітаційно взаємодіючих аксіонів, описаних Гамільтоном,

$$\begin{aligned} H_{N_1, N_2} = & -\frac{\hbar^2}{2m_1} \sum_{j=1}^{N_1} \Delta_{\vec{r}_j} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \sum_{k=1}^{N_2} \Delta_{\vec{r}_k} - Gm_1^2 \sum_{1 \leq l < s \leq N_1} \frac{1}{|\vec{r}_l - \vec{r}_s|} - \\ & - Gm_2^2 \sum_{1 \leq p < q \leq N_2} \frac{1}{|\vec{r}_p, \dots, \vec{r}_q|} - Gm_1 m_2 \sum_{l=1}^{N_1} \sum_{m=1}^{N_2} \frac{1}{|\vec{r}_l, \dots, \vec{r}_m|}, \quad (3.36) \end{aligned}$$

де  $m_1, N_1, \vec{r}_i$  – маса аксіонів, кількість частинок і координата першої компоненти, і  $m_2, N_2, \vec{r}_i$  – маса аксіонів, кількість частинок і координата другої компоненти ( $\vec{r}_i, \vec{r}_j \in R^3$ ),  $G$  – гравітаційна константа. Введемо безрозмірні координати,  $\vec{x}_i$  та  $\vec{y}_j$ :  $\vec{x}_i = \vec{r}_i/r_0$ ,  $\vec{y}_j = \vec{r}_j/r_0$ , де нижче буде визначений розмірний параметр,  $r_0$ . Маємо з (3.36),

$$\begin{aligned} H_{N_1, N_2} \equiv \frac{H_{N_1, N_2}}{\frac{\hbar^2}{m_1 r_0^2}} = & -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N_1} \Delta_{\vec{x}_j} - \frac{1}{2 \left(\frac{m_2}{m_1}\right)} \sum_{k=1}^{N_2} \Delta_{\vec{y}_k} - \\ & - \frac{\lambda_1}{N_1} \sum_{1 \leq l < s \leq N_1} \frac{1}{|\vec{x}_l - \vec{x}_s|} - \frac{\lambda_2}{N_2} \sum_{1 \leq p < q \leq N_2} \frac{1}{|\vec{y}_p, \dots, \vec{y}_q|} - \\ & - \frac{\lambda_3}{N_1 + N_2} \sum_{l=1}^{N_1} \sum_{m=1}^{N_2} \frac{1}{|\vec{x}_l, \dots, \vec{y}_m|}, \quad (3.37) \end{aligned}$$

де вводяться безрозмірні константи,

$$\lambda_1 = \frac{Gm_1^3 r_0 N_1}{\hbar^2}, \lambda_2 = \frac{Gm_2^2 m_1 r_0 N_2}{\hbar^2}, \lambda_3 = \frac{Gm_1^2 m_2 r_0 (N_1 + N_2)}{\hbar^2}. \quad (3.38)$$

Визначаємо характеристичний розмірний параметр,  $r_0$ , з умови,  $\lambda_1 = 1$ . Це означає, що  $r_0$  відноситься до першого компонента. Маємо з (3.4),

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{Gm_1^3 N_1}, \lambda_2 = \frac{N_2 m_2^2}{N_1 m_1^2}, \lambda_3 = \frac{(N_1 + N_2) m_2}{N_1 m_1}. \quad (3.39)$$

### Наближення середнього поля

Безрозмірний гамільтоніан,  $H_{N_1, N_2}$  в (3.37) має аналогічну форму, як безрозмірний гамільтоніан,  $H_N$  (3.5) (див. Також (3.7)) в [40], де було показано, що наближення середнього поля може бути використане, коли  $N_{1,2} \rightarrow \infty$ . Для  $N_1 + N_2$  взаємодіючих аксіонів ми можемо вважати  $N_{1,2}$  дуже великими і сумарна маса обох компонентів,  $M_{1,2} = m_{1,2} N_{1,2}$ , зафіксованими (як аксіонні маси,  $m_{1,2}$  крихітні). У наближенні середнього поля враховують початково розчленований стан  $N_1$  однакових частинок (перша компонента) та  $N_2$  однакових частинок (друга компонента) з початковою хвильовою функцією,

$$\begin{aligned} & \psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_{N_1}; \vec{y}_1, \dots, \vec{y}_{N_2}; 0) = \\ & = \psi_1(\vec{x}_1, 0) \otimes \dots \otimes \psi_1(\vec{x}_{N_1}, 0) \otimes \psi_2(\vec{y}_1, 0) \otimes \dots \otimes \psi_1(\vec{y}_{N_2}, 0), \end{aligned} \quad (3.40)$$

В [40] показано, що за будь-який фіксований безрозмірний час,  $\tau = \frac{\hbar}{m_1 r_0^2} t$ , хвильова функція,

$$\begin{aligned} & \psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_{N_1}; \vec{y}_1, \dots, \vec{y}_{N_2}; \tau) = \\ & = \psi_1(\vec{x}_1, \tau) \otimes \dots \otimes \psi_1(\vec{x}_{N_1}, \tau) \otimes \psi_2(\vec{y}_1, \tau) \otimes \dots \otimes \psi_1(\vec{y}_{N_2}, \tau). \end{aligned} \quad (3.41)$$

Одночастинні хвильові функції,  $\phi_1(\vec{x}, \tau) = r_0^{3/2} \psi_1(\vec{x}, \tau)$  і  $\phi_2(\vec{y}, \tau) = r_0^{3/2} \psi_2(\vec{y}, \tau)$  для нашого гамільтоніана (3.3) задовольняють нелінійні сполучені інтегро-диференціальні рівняння типу Хартрі-Фока,

$$\begin{aligned}
 i \frac{\partial \phi_1(x, \tau)}{\partial \tau} &= \left( -\frac{1}{2} \Delta_x - \int \frac{|\phi_1(x', \tau)|^2 d^3 x'}{|x - x'|} - \beta \int \frac{|\phi_2(x', \tau)|^2 d^3 x'}{|x - x'|} \right) \phi_1(x, \tau), \\
 i \sqrt{\alpha} \frac{\partial \phi_2(x, \tau)}{\partial \tau} &= \\
 &= \left( -\frac{1}{2} \Delta_x - \alpha \beta \int \frac{|\phi_2(x', \tau)|^2 d^3 x'}{|x - x'|} - \alpha \int \frac{|\phi_1(x', \tau)|^2 d^3 x'}{|x - x'|} \right) \phi_2(x, \tau), \\
 \alpha &= \left( \frac{m_2}{m_1} \right)^2, \beta = \frac{M_2}{M_1}.
 \end{aligned} \tag{3.42}$$

Для простоти ми опустили векторний символ для координат у (3.42) та нижче. Ми також використали підстановку у другому рівнянні в (3.42):  $y \rightarrow x$ .

### 3.2.2. Завдання власного значення в наближенні середнього поля

Відповідна задача власного значення в наближенні середнього поля може бути сформульована так. Ми припускаємо що всі аксіони, як для обох компонентів, знаходяться в однакових сферично симетричних основних станах, які описуються хвильовими функціями,  $\phi_1(x)$  і  $\phi_2(x)$ . Хвильові функції задовольняють нелінійним стаціонарним рівнянням типу Хартрі-Фока,

$$\varepsilon_1 \phi_1(x) = \left( -\frac{1}{2} \Delta_x - \int \frac{|\phi_1(x')|^2 d^3 x'}{|x - x'|} - \beta \int \frac{|\phi_2(x')|^2 d^3 x'}{|x - x'|} \right) \phi_1(x), \tag{3.43}$$

$$\varepsilon_2 \phi_2(x) = \left( -\frac{1}{2} \Delta_x - \alpha \beta \int \frac{|\phi_2(x')|^2 d^3 x'}{|x - x'|} - \alpha \int \frac{|\phi_1(x')|^2 d^3 x'}{|x - x'|} \right) \phi_2(x),$$

де  $\varepsilon_{1,2}$  – безрозмірні власні значення. Для зручності ми представляємо тут відношення між розмірними і безрозмірними параметрами, які було використано,

$$\begin{aligned} r_0 &= \frac{\hbar^2}{G m_1^2 N_1} - \text{характеристичний розмір,} \\ \vec{x} &= \frac{\vec{r}}{r_0} - \text{безрозмірна координата,} \\ \tau &= \frac{\hbar}{m_1 r_0^2} t - \text{безрозмірний час,} \\ \phi_{1,2} &= r_0^{3/2} \psi_{1,2} - \text{безрозмірна хвильова функція,} \\ \varepsilon_1 &= \frac{m_1 r_0^2}{\hbar^2} E_1, \varepsilon_1 = \frac{\sqrt{m_1 m_2} r_0^2}{\hbar^2} E_2 - \text{безрозмірна енергія.} \end{aligned} \quad (3.44)$$

В (3.44)  $r_0$  – в наближенні середнього поля гравітаційний аналог радіусу Бора в атомі водню вирази в (3.43) можна спростити. Дійсно, як відомо, інтеграція по полярних і азимутальних кутах в (3.43) можна виконати явно. Використовуючи вираз,

$$\int_0^\pi d\theta \frac{\sin \theta}{\sqrt{x^2 - 2xx' \cos \theta + x'^2}} = \begin{cases} \frac{2}{x}, & x > x', \\ \frac{2}{x'}, & x < x', \end{cases} \quad (3.45)$$

ми отримаємо з (3.43) два сполучені інтегро-диференціальні рівняння для хвильових функцій,  $\phi_1(x)$  та  $\phi_2(x)$ , типу Хартрі-Фока,

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (x \phi_1(x)) - 4\pi \left( \frac{1}{x} \phi_1(x) \int_0^x s^2 \phi_1^2(s) ds + \phi_1(x) \int_x^\infty s \phi_1^2(s) ds \right) \\ - 4\pi \beta \left( \frac{1}{x} \phi_2(x) \int_0^x s^2 \phi_2^2(s) ds + \phi_2(x) \int_x^\infty s \phi_2^2(s) ds \right) = \varepsilon_1 \phi_1(x), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (x\phi_2(x)) - 4\pi\alpha\beta \left( \frac{1}{x} \phi_2(x) \int_0^x s^2 \phi_2^2(s) ds + \phi_2(x) \int_x^\infty s \phi_2^2(s) ds \right) \\
& - 4\pi\alpha \left( \frac{1}{x} \phi_1(x) \int_0^x s^2 \phi_1^2(s) ds + \phi_1(x) \int_x^\infty s \phi_1^2(s) ds \right) \\
& = \varepsilon_2 \phi_2(x).
\end{aligned} \tag{3.46}$$

Також ми додаємо 2 стандартні умови,

$$\phi_{1,2}(x = \infty) = 0 \tag{3.47}$$

$$4\pi \int_0^\infty x^2 \phi_{1,2}^2(x) dx = 1.$$

Використовуючи підстановку

$$\varphi_{1,2}(x) = \sqrt{4\pi x} \phi_{1,2}(x), \tag{3.48}$$

ми отримуємо з (3.46) рівняння, які включають ефективні потенціали,

$$\begin{aligned}
\varepsilon_1 \varphi_1(x) &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varphi_1(x)}{\partial x^2} + U_1(x) \varphi_1(x), \\
U_1(x) &= -\left( \frac{1}{x} \int_0^x \varphi_1^2(s) ds + \int_x^\infty \frac{\varphi_1^2(s)}{s} ds \right) \\
&\quad - \beta \left( \frac{1}{x} \int_0^x \varphi_2^2(s) ds + \int_x^\infty \frac{\varphi_2^2(s)}{s} ds \right), \\
\varepsilon_1 &= \frac{1}{2} \int_0^\infty \left( \frac{\partial \varphi_1(x)}{\partial x} \right)^2 dx + \int_0^\infty U_1(x) \varphi_1^2(x) dx, \\
\varepsilon_2 \varphi_2(x) &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varphi_2(x)}{\partial x^2} + U_2(x) \varphi_2(x),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
U_2(x) &= -\alpha \left( \frac{1}{x} \int_0^x \varphi_1^2(s) ds + \int_x^\infty \frac{\varphi_1^2(s)}{s} ds \right) \\
&\quad - \alpha\beta \left( \frac{1}{x} \int_0^x \varphi_2^2(s) ds + \int_x^\infty \frac{\varphi_2^2(s)}{s} ds \right), \\
\varepsilon_2 &= \frac{1}{2} \int_0^\infty \left( \frac{\partial \varphi_2(x)}{\partial x} \right)^2 dx + \int_0^\infty U_2(x) \varphi_2^2(x) dx, \\
\varphi_{1,2}(0) &= \varphi_{1,2}(\infty) = 0, \\
\int_0^\infty \varphi_{1,2}^2(x) dx &= 1.
\end{aligned} \tag{3.49}$$

### 3.2.3. Числовий розв'язок

Рішення для основного стану системи рівнянь. (3.43) були знайдені чисельно як стаціонарні рішення системи ефективних динамічних рівнянь,

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial \phi_1(x, t)}{\partial t} &= \left( \frac{1}{2} \Delta_x + V_1(x, t) + \beta V_2(x, t) + \varepsilon_1 \right) \phi_1(x, t) \\
&\equiv \hat{H}_1[V_1, \beta V_2; \varepsilon_1] \phi_1(x, t),
\end{aligned} \tag{3.50}$$

$$\begin{aligned}
i \frac{\partial \phi_2(x, t)}{\partial t} &= \left( \frac{1}{2} \Delta_x + \alpha V_1(x, t) + \alpha\beta V_2(x, t) + \varepsilon_2 \right) \phi_2(x, t) \\
&\equiv \hat{H}_2[\alpha V_1, \alpha\beta V_2; \varepsilon_2] \phi_2(x, t)
\end{aligned} \tag{3.51}$$

$$V_1(x, t) = \int_0^\infty \frac{|\phi_1(x', t)|^2 d^3 x'}{|x - x'|}, \quad V_2(x, t) = \int_0^\infty \frac{|\phi_2(x', t)|^2 d^3 x'}{|x - x'|}. \tag{3.52}$$

Метод неявної кінцевої різниці першого порядку у часі використовувався відповідно з кроками дискретизації у часі та просторі,  $\Delta t$  та  $\Delta x$ , відповідно. Цей метод не є консервативним для параболічного типу

рівнянь, (3.50), (3.51). Однак саме його дисипативні властивості, докладно описані вище [41], забезпечують перехід розглянутої системи аксіонів з певного початкового стану в потрібний стаціонарний стан. Час цього переходу та відповідне стаціонарне рішення залежать від початкової умови. Його слід вибирати ретельно, щоб уникнути розбіжностей в описаній схемі, а також рішення, відповідні збудженим станам системи. Метод, який було обрано для вирішення цих проблем, представлений нижче.

Припустимо, що стаціонарний стан системи,  $\phi_{1,0}(x)$ ,  $\phi_{2,0}(x)$ ,  $\varepsilon_{1,0}$ ,  $\varepsilon_{2,0}$ , для параметрів  $\alpha_0$  та  $\beta_0$  відомий. Необхідно знайти рішення для:  $\alpha_1 = \alpha_0 + \Delta\alpha$ ,  $\beta_1 = \beta_0 + \Delta\beta$ . Послідовність операцій, що використовуються в ітераційному алгоритмі, полягає в наступному (другий індекс функцій і значень, представлений вище та нижче, вказує кількість виконаних ітерацій,  $k = 1, 2, 3, \dots, K$ ):

Знайдемо розв'язок рівняння. (3.50),

$$i \frac{\partial \phi_{1,k}(x, t)}{\partial t} \equiv \hat{H}_1[V_{1,k-1}, \beta_1 V_{2,k-1}; \varepsilon_{1,k-1}] \phi_{1,k-1}(x, t), \text{ після } n \text{ кроків по часу.}$$

Нормалізуємо,  $\phi_{1,k}(x, t)$ , і обчислимо / перерахуємо,  $V_{1,k}$ ,  $\varepsilon_{1,k}$ .

Знайдемо розв'язок рівняння (3.17),

$$i \frac{\partial \phi_{2,k}(x, t)}{\partial t} \equiv \hat{H}_2[\alpha_1 V_{1,k}, \alpha_1 \beta_1 V_{2,k-1}; \varepsilon_{2,k-1}] \phi_{2,k}(x, t), \text{ після } n \text{ кроків по часу.}$$

Нормалізуємо отриману функцію,  $\phi_{2,k}(x, t)$ , обчислимо,  $V_{2,k}$ ,  $\varepsilon_{2,k}$ . Для наступної,  $(k + 1)$ -ї ітерації, і повторимо послідовність кроків 1-4.

У своїх розрахунках ми обрали область для  $x$ :  $0 \leq x \leq X = 15$  (з граничними умовами  $\phi_1(x = X) = \phi_2(x = X)$ ,  $\Delta x = X/5 \times 10^4$ ,  $\Delta t = 0.8$ ,  $n = 200$ ,  $K = 15$ ,  $\Delta\alpha = 0.2$ ,  $\Delta\beta = 0.002$ ).

При такій дискретності параметрів,  $\alpha$  і  $\beta$ , обчислення стаціонарних станів системи по прямим,  $1 \leq \alpha \leq 100$  ( $\beta = const$ ), або  $1 \leq \beta \leq 100$  ( $\alpha = const$ ), займає 2 години роботи стандартного 3,2 ГГц-робочого комп'ютера. В результаті для кожного набору параметрів,  $\alpha$  і  $\beta$ , значення енергії,  $\varepsilon_1$  і  $\varepsilon_2$ , обчислюються з відносною похибкою  $\Delta \varepsilon_{1,2} / \varepsilon_{1,2} < 10^{-6}$ . В якості



«початкового стану» для обчислення довільної «траєкторії» системи на площині,  $(\alpha, \beta)$ , зручно вибирати рішення системи для  $\alpha = 1$ . У цьому випадку функції,  $\phi_1(x) = \phi_2(x)$ , легко знайти з рівняння,

$$i \frac{\partial \phi_1(x, t)}{\partial t} = \left( \frac{1}{2} \Delta_x + (1 + \beta) V_1(x, t) + \varepsilon_1 \right) \phi_1(x, t), \quad (3.53)$$

стаціонарне рішення, з фізично виправданими початковими наближеннями, легко знайти методом ітерації, описаним вище (детальніше див. посилання [41]).

### 3.2.4. Результати чисельного розв'язку

У цьому підрозділі будуть представлені результати чисельних моделювань. Було обчислено радіальний розподіл масової густини ЛА та спроектовано параметри, які можна використовувати для відрізнєння двокомпонентної ДМХ від однокомпонентної ДМГ.

Як буде сказано нижче, при всіх значеннях параметрів,  $\beta = M_2/M_1$  та  $\alpha = (m_2/m_1)^2$ , область локалізації важких аксіонів (НА) вужча, ніж область локалізації легких аксіонів (ЛА). Залежно від співвідношення загальних мас аксіонічних підсистем,  $\beta$ , в центрі системи можуть бути реалізовані два обмежуючих випадки концентрації НА. У першому випадку фактор «стиснення» НА є головним чином обумовлений потенціалом, що виробляється ЛА, просторовий розподіл якого слабо порушується наявністю НА. У другому випадку просторовий розподіл НА визначається головним чином його власним потенціалом, що також суттєво звужує область локалізації ЛА. Очевидно, що перший випадок може бути реалізований лише за малого  $\beta \ll 1$ . На рис. 1 представлені три функції густини ймовірності,

$$p_1(x) = 0.5(1 + q)|\phi_1(x)|^2, p_2(x) = 0.5(1 - q)|\phi_2(x)|^2 \text{ та } P(x),$$

$$P(x) = (M_1/M)p_1(x) + (M_2/M)p_2(x) = p_1(x) + p_2(x),$$

$$p_{1,2}(x) = |\phi_{1,2}(x)|^2, p_1(x) = 0.5 \times (1 + q)p_1(x), p_2(x) = 0.5 \times (1 - q)p_1(x),$$

$$M_1 + M_2 = M, \frac{M_2}{M_1} = \frac{1-q}{1+q} = \beta. \quad (3.54)$$

В (3.54) для зручності вводиться параметр  $q$ .

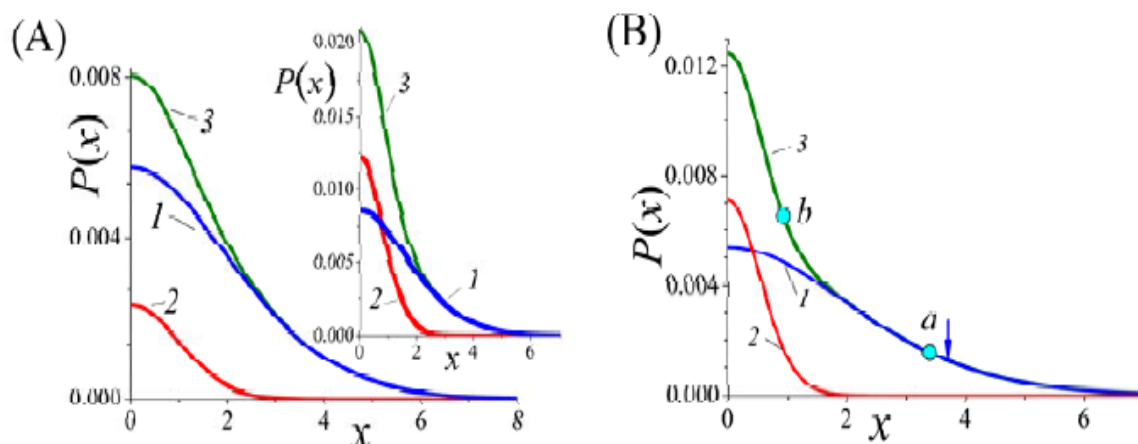


Рисунок 3.3 – розподіл густини ймовірності,  $p_1(x)$  – крива 1,  $p_2(x)$  – 2,  $P(x)$  – 3, при різних параметрах. (А) –  $\alpha = 10$ ,  $\beta = 0.05$ ; Вставка –  $\alpha = 10$ ,  $\beta = 0.12$ . (В) –  $\alpha = 75$ ,  $\beta = 0.02$ .

Залежно від поведінки  $P(x)$ , можна виявити наявність другого компонента ДМН. Наприклад, утворення розподілу,  $P(x)$ , з двох різних масштабних розподілів,  $p_1(x)$  та  $p_2(x)$ , (Рис.1В), чітко виявляється існування в двох точках ( $a$  і  $b$ ), де абсолютне значення від'ємної кривизни  $P(x)$  є максимальним. Стрілка вказує точку екстремуму негативної кривизни  $p_1(x)$  у випадку  $\beta = 0$ .

### 3.3. Розмір аксіонів темної матерії в присутності баріонної речовини

Будемо вважати ореол темної матерії (DMH) галактики, що містить ультралегкі аксіони (ULA) за наявності баріонової маси. DMH описується як конденсат Боза-Ейнштейна (BEC) у своєму основному стані. Баріонна речовина описується заданим розподілом її густини. У наближенні середнього поля (MF) було отримано інтегро-диференціальне рівняння типу Хартрі-Фока для сферично симетричної хвильової функції компонента DMH. Це рівняння включає два незалежні безрозмірні параметри: (i)  $\beta$  – співвідношення баріонних та аксіонових загальних мас та (ii)  $\xi$  – співвідношення характерних просторових параметрів баріона та аксіону. Було розробили «алгоритм дисипації» для чисельного вивчення основного стану цієї аксіон-баріонної системи. Було побудовано двовимірну діаграму, яка характеризує характерний розмір DMH як функцію,  $\beta$  і  $\xi$ .

#### 3.3.1. Нелінійне інтегрально-диференціальне рівняння для (DMH) за наявності баріонної маси

Почнемо з нерелятивістського рівняння Шредінгера,

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t)}{\partial t} = H_N \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; t), \quad (3.55)$$

для  $N$  аксіонів, які гравітаційно взаємодіють між собою та із заданим розподілом баріонної речовини. Система описана Гамільтоніаном,

$$H_N = \sum_{i=1}^N m_a U_b(\vec{r}_i) - \frac{\hbar^2}{2m_a} \sum_{i=1}^N \Delta_{\vec{r}_i} - G m_a^2 \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}. \quad (3.56)$$

В (3.22)  $U_b(r)$  – заданий баріонний потенціал,

$$U_b(r) = -G M_b \int \frac{\rho_b(r') d^3 r'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \quad (3.57)$$

$m_a$  та  $M_b$  – маса аксіонів і загальна баріонова маса, відповідно, і  $\rho_b(r)$  є густина баріонної речовини. Ми використовуємо умову нормалізації для  $\rho_b(r)$ ,

$$\int \rho_b(r) d^3r = 1, \quad (3.58)$$

як вже відмічено в (3.57).

Використовуючи для конкретності функцію з [42] та умови нормалізації (3.58), ми маємо нормалізовану баріонну густину,

$$\rho_b(r) = \frac{r_b}{4\pi r^2 (r + r_b)^2}. \quad (3.59)$$

Використовуючи підхід, описаний в [41, 31], ми отримуємо одночастинне рівняння типу Хартрі-Фока в наближенні середнього поля (MF),

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \\ = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_a} \Delta_{\vec{r}} - Gm_a M_b \int \frac{\rho_b(r') d^3r'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right. \\ \left. - Gm_a M_a \int \frac{|\psi(\vec{r}', t)|^2 d^3r'}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right] \psi(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (3.60)$$

де  $M_a = m_a N$  — загальна маса аксіонічного ореолу. Введемо позначення,

$$r_a = \frac{\hbar^2}{Gm_a^2 M_a} — \text{характеристичний розмір ореолу,}$$

$$\vec{x} = \frac{\vec{r}}{r_a} — \text{безрозмірна координата,}$$

$$\tau = \frac{\hbar}{m_a r_a^2} t — \text{безрозмірний час,} \quad (3.61)$$

$$\phi(\vec{x}, \tau) = r_a^{3/2} \psi(\vec{r}, t) — \text{безрозмірна хвильова функція,}$$

$$\rho_b(x) = r_a^3 \rho_b(r).$$

У безрозмірних позначеннях (3.61) рівняння (3.55) стає,

$$i \frac{\partial \phi(\vec{x}, \tau)}{\partial \tau} = \left[ -\frac{1}{2} \Delta_{\vec{x}} - \beta \int \frac{\rho_b(\vec{x}') d^3 \vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|} - \int \frac{|\phi(\vec{x}', \tau)|^2 d^3 \vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \right] \phi(\vec{x}, \tau),$$

$$\rho_b(x) = \frac{\xi}{4\pi x^2 (x + \xi)^2},$$

$$\int |\phi(\vec{x}, \tau)|^2 d^3 \vec{x} = 1, \int \rho_b(x) d^3 \vec{x} = 1. \quad (3.62)$$

У (3.62) вводяться два безрозмірні параметри,

$$\beta = \frac{M_b}{M_a}, \xi = \frac{r_b}{r_a}, \quad (3.63)$$

і замість цього  $\vec{x}$  ми використовуємо  $x$ .

Використовуючи явний вираз для баріонної густини в (3.61), баріонний потенціал у (3.62) стає,

$$U_b(x) = -\beta \int \frac{\rho_b(x') d^3 \vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|}$$

$$= -\xi \beta \left( \frac{1}{x} \int_0^x \frac{dx'}{(\xi + x')^2} + \int_x^\infty \frac{dx'}{x'(\xi + x')^2} \right)$$

$$U_b(x) = -\frac{\beta}{\xi} \ln \left( 1 + \frac{\xi}{x} \right). \quad (3.64)$$

### Гранична задача на власні значення в наближенні середнього поля

Нижче нас цікавлять сферично симетричні власні функції рівняння  $\phi(x)$  (3.62). Відповідна задача власного значення для рівняння (3.62) описується рівнянням,

$$\varepsilon \phi(x) = \left( -\frac{1}{2} \Delta_x - \frac{\beta}{\xi} \ln \left( 1 + \frac{\xi}{x} \right) - \int \frac{|\phi(x')|^2 d^3 \vec{x}'}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \right) \phi(x), \quad (3.65)$$

де  $\varepsilon = \frac{m_a r_a^2}{\hbar^2} E$ , тоді рівняння (3.65) можна записати як,

$$\begin{aligned}
\varepsilon \phi(x) = & -\frac{1}{2x} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (x\phi(x)) \\
& -\frac{\beta}{\xi} \ln\left(1 + \frac{\xi}{x}\right) \phi(x) \\
& -4\pi \left( \frac{1}{x} \phi(x) \int_0^x s^2 \phi^2(s) ds + \phi(x) \int_x^\infty s \phi^2(s) ds \right) \\
& -4\pi \beta \left( \frac{1}{x} \phi(x) \int_0^x s^2 \phi^2(s) ds + \phi(x) \int_x^\infty s \phi^2(s) ds \right), \\
\phi(x = \infty) = & 0, \quad 4\pi \int_0^\infty x^2 \phi^2(x) dx = 1.
\end{aligned} \tag{3.66}$$

Для чисельного моделювання зручно використовувати заміну для,

$$\varphi(x) = \sqrt{4\pi x} \phi(x). \tag{3.67}$$

Отримаємо з (3.66) рівняння, які включають ефективні потенціали,

$$\varepsilon \varphi(x) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + U(x) \varphi(x), \tag{3.68}$$

$$U(x) = -\left( \frac{\beta}{\xi} \ln\left(1 + \frac{\xi}{x}\right) + \frac{1}{x} \int_0^x \varphi^2(s) ds + \int_x^\infty \frac{\varphi^2(s)}{s} ds \right), \tag{3.69}$$

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \int_0^\infty \left( \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} \right)^2 dx + \int_0^\infty U(x) \varphi^2(x) dx, \tag{3.70}$$

$$\varphi(0) = \varphi(\infty) = 0, \quad \int_0^\infty \varphi^2(x) dx = 1. \tag{3.71}$$

### 3.3.3. Числовий розв'язок

Рішення системи рівнянь (3.68-3.71) ґрунтується на ітераційному методі пошуку стаціонарного рішення рівняння,

$$\frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial t} = \frac{i}{2} \frac{\partial^2 \varphi(x, t)}{\partial x^2} + i(\varepsilon(t) - U(x, t))\varphi(x, t), \quad (3.72)$$

в області  $0 \leq x \leq X$ . Значення верхньої границі розрахункової області,  $X = 25$ , гарантує високу точність рішення даної задачі, якщо в інтегралах (3.68) - (3.71) використовувати його замість нескінченності.

Один цикл ітерацій включає в себе наступні обчислювальні процедури. Якщо хвильова функція,  $\varphi^{(k)}(x, t)$ , відома в кінці виконання ітераційного циклу з номером  $k$ , то на основі цієї функції виконується перевизначення потенціалу,  $U^{(k)}(x)$ , та енергії,  $\varepsilon^{(k)}$ , (див. (3.69) та (3.70)). Знайдені значення,  $U^{(k)}(x)$  та  $\varepsilon^{(k)}$ , використовуються в рівнянні (3.72) для визначення  $\varphi^{(k+1)}(x, t^{(k)} + T)$  в кінці  $(k + 1)$ -ого циклу ітерацій ( $T$  – період ітерацій) і т.д. до встановлення стаціонарного стану.

Тепер відзначимо важливі фактори, які забезпечують швидку збіжність ітерацій. Обчислення  $\varphi^{(k+1)}(x, t)$  з початковою умовою  $\varphi(x, t = t^{(k)}) = \varphi^{(k)}(x)$  виконуємо з використанням неявного різничного методу першого порядку точності за часом [R1],

$$\frac{\varphi_i^{j+1} - \varphi_i^j}{\Delta t} = \frac{i}{2} \frac{\varphi_{i+1}^{j+1} - 2\varphi_i^{j+1} + \varphi_{i-1}^{j+1}}{\Delta x^2} + i(\varepsilon^{(k)} - U^{(k)}(x))\varphi_i^{j+1} \quad (3.73)$$

де  $\Delta t$  та  $\Delta x$  кроки дискретизації по координаті та часу. Ми використовували значення  $\Delta t = 0.5$  і  $\Delta x = X/N$ ,  $N = 4 \times 10^4$ . Один ітераційний цикл передбачає розрахунок  $J$  кроків у часі ( $J = 300, T = J\Delta t$ ) для отримання наступного наближення хвильової функції,  $\varphi^{(k+1)}(x, t^{(k)} + T)$ .

У загальному випадку, такий метод вирішення рівняння Шредінгера є недосконалим, оскільки призводить до нефізичного загасання хвильової функції в часі. Однак в даному ітераційному методі саме це згасання забезпечує збіжність запропонованого методу ітерацій. Пояснимо це твердження детально.

Представимо хвильову функцію  $\varphi^{(k)}(x, t^{(k)})$  у вигляді ряду,

$$\varphi^{(k)}(x, t^{(k)}) = \sum a_n \hat{\varphi}_n(x), \quad (3.74)$$

де  $\hat{\varphi}_n(x)$  є точними рішеннями рівняння (3.68) для рівнів енергії  $\varepsilon_n$ . Розрахунок еволюції  $\varphi^{(k)}(x, t)$  за схемою (3.39) приводить [41] до виразу,

$$\varphi^{(k)}(x, t) = \sum a_n e^{i\delta E_n t} e^{-\gamma_n[t-t^{(k)}]} \hat{\varphi}_n(x), \gamma_n = \frac{\delta E_n^2 \Delta t}{2}, \delta E_n = \varepsilon^{(k)} - \varepsilon_n. \quad (3.75)$$

З (3.75) видно, що спектр розкладання звужується з плином часу і концентрується в зоні  $\Delta \tilde{E}$ , яка охоплює величину  $\varepsilon^{(k)}$ . Тому розрахунок чергового наближеного значення енергії,  $\varepsilon^{(k+1)}$ , по функції  $\varphi^{(k+1)}(x, t)$  на  $(k+1)$ -ому циклі ітерацій дасть величину близьку до одного з рівнів  $\varepsilon_n \in \Delta \tilde{E}$ , ніж на  $k$ -ому циклі. В результаті послідовності ітерацій рішення рівняння (3.72) сходиться до одного з точних рішень рівнянь (3.68) ( $\partial \varphi(x, t)/\partial t \rightarrow 0$  у (3.72)). До якого саме рівня – це залежить від початкового наближення, що обирається на основі якісних фізичних міркувань. Очевидно, що для пошуку основного рівня слід починати ітераційну процедуру з функції виду  $\varphi^{(0)}(x) = x e^{(-x^2/\delta^2)}$ . З цієї функції з (3.35) визначити  $U^{(0)}(x)$ . Значення енергії,  $\varepsilon^{(0)}$ , слід задати свідомо від'ємним, оскільки співвідношення (3.70) не гарантує від'ємного значення  $\varepsilon^{(0)}$  при використанні в ньому функції  $\varphi^{(0)}(x)$ . У наступних ітераціях при обчисленнях  $\varepsilon^{(k)}$  і  $U^{(0)}(x)$  краще використовувати не функцію  $\varphi^{(k)}(x)$ , а її модуль  $|\varphi^{(k)}(x)|$  – якщо рішення близько до точного,



то реальна і уявна частини хвильової функції подібні один одному, відрізняючись тільки на коефіцієнт, так що заміна,  $\varphi^{(k)}(x) \rightarrow |\varphi^{(k)}(x)|$ , не змінює результату. Однак такий прийом прискорює збіжність ітерацій до точного рішення.

Оскільки різнісна схема (3.73) вносить загасання, то на початку кожного циклу ітерацій слід перенормувувати хвильову функцію на одиницю згідно (3.71). При наближенні до стаціонару відповідний нормуючий множник наближається до одиниці, і послідовність значень енергії,  $\{\varepsilon^{(k)}\}$ , також насичується. Контроль цих величин визначає число необхідних ітерацій,  $N_{iter}$ .

У нашій задачі зручно обчислювати характеристики даної системи на площині  $(\beta, \xi)$  вздовж траєкторій,  $\xi = const$ , змінюючи величину  $\beta$ . На початку таких траєкторій ( $\beta = 0$ , бозони відсутні) хвильова функція аксіонів легко обчислюється [41], і потім використовується як початкове наближення для наступних варіантів з нарощуванням  $\beta$ . Зміна параметра  $\beta$  на 0.3 вимагає 7 ітерацій ( $N_{iter} = 7$ ) для отримання нового рішення (похибка в значенні енергії,  $|\delta\varepsilon| < 10^{-5}$ , якщо в якості початкового наближення використовувати рішення для попереднього значення  $\beta$ ).

У заключенні відзначимо, що використання різнісної схеми Кранка-Ніколсона [31] для вирішення рівняння (3.72) не призводить до збіжності ітерацій, оскільки така схема не вносить загасання у хвильову функцію і не звужує спектр розкладання (3.75) від ітерації до ітерації.

### 3.3.4. Результати

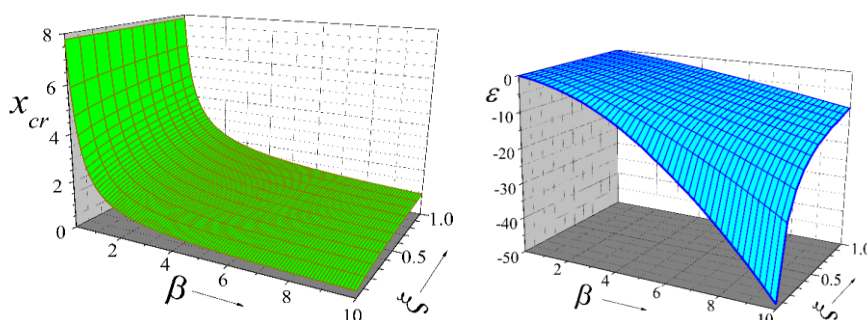


Рисунок 3.4 – розподілу густини імовірності  $0.1 \leq \beta \leq 10$ ,  $0.01 \leq \alpha \leq 1$

Як було вказано раніше, у відсутності бозонів  $x_{cr} \approx 8$ . В цьому випадку  $P(x_{cr} = 8) \approx 0.0091 \times P(x = 0)$ . По такому ж критерію була визначена величина  $x_{cr}$  при присутності бозонів.

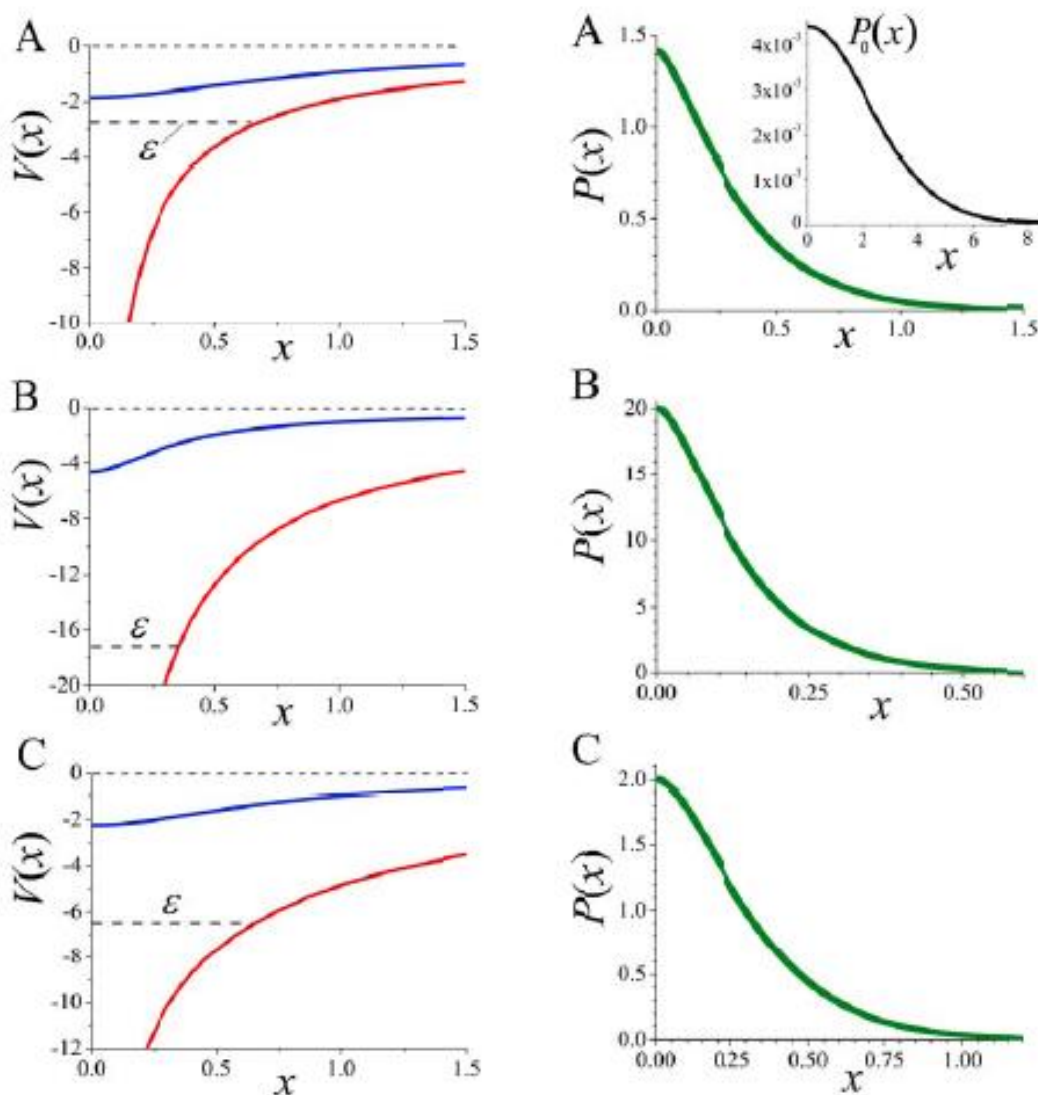


Рисунок 3.4 – Зліва потенціал аксіонів (синя крива) та бозонів (червона крива). Справа – відповідні густини розподілу аксіонів,  $P(x) = |\psi(x)|^2$ . Верхня вставка -  $P_0(x)$  - густина розподілу аксіонів за відсутності бозонів ( $\varepsilon_0 \approx -0.1628$ , глибина власної потенціальної ями  $-V_0 \approx -0.3158$ ). (A) -  $\xi = 0.1, \beta = 2$  (B) -  $\xi = 0.1, \beta = 7$  (C) -  $\xi = 1.0, \beta = 7$ .

### ВИСНОВКИ ДО РОЗДІЛУ 3

За допомогою створеного алгоритму вдалося вирішити нелінійне рівняння, що еквівалентне рівнянням Шредінгера-Ньютона.

Не повинна виключатися можливість того, що деякі спіральні галактики мають ореол ТМ, що складається з аксіонів в основному стані ВЕК, масою, оціненою в цій. Детально описані вимоги та математичні виклади для однокомпонентної задачі, двокомпонентної задачі та задачі де присутня баріонна матерія та аксіони. Вдалося одержати стійкий основний стан та нестійкі збудженні стани розглянутих систем.

## ВИСНОВКИ

Припускається, що темна матерія не повинна бути унікальною однокомпонентною речовиною в цілому Всесвіті. Вміст темної матерії може бути відмінним у галактиках різного типу або навіть у галактиках одного типу. Таким чином, не повинна виключатися можливість того, що деякі спіральні галактики мають ореол ТМ, що складається з аксіонів в основному стані ВЕК, масою, оціненою в цій роботі.

В даній дипломній роботі був розроблений та програмно реалізований ефективний "дисипативний" чисельний алгоритм для знаходження основного стану та деяких збуджених станів нелінійного інтегро-диференціального рівняння Шредінгера. Вдалося знайти основний стан для однокомпонентної аксіонної задачі, двокомпонентної аксіонної задачі та для задачі де присутні аксіони та баріонна речовина. "Дисипативний" чисельний алгоритм може бути ефективно використаний при чисельному вирішенні ряду прикладних задач, які описуються системами нелінійних рівнянь або нелінійними інтегро-диференціальними рівняннями.

Також було оцінено масу надлегкого аксіона,  $m \sim 1.6 \times 10^{-25} eV$ , що можна порівняти з багатьма іншими припущеннями.

У заключенні відзначимо, що для реалізації даної задачі була використана неявна різнісна схема, тоді як використання різнісної схеми Кранка-Ніколсона для вирішення інтегро-диференціальних рівнянь Шредінгера-Ньютона, не призводить до збіжності ітерацій, оскільки така схема не вносить загасання у хвильову функцію і не звужує спектр розкладання (3.75) від ітерації до ітерації.

## ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. Planck Collab. (N. Aghanim *et al.*), arXiv:1807.06212.
2. J. F. Navarro, C. S. Frenk and S. M. White, *Astrophys. J.* **462**, 563 (1996).
3. R. H. Wechsler and J. L. Tinker, *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **56**, 435 (2018).
4. W. Hu, R. Barkana and A. Gruzinov, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1158 (2000).
5. C. G. Boehmer and T. Hartko, *J. Cosmol. Astropart. Phys.* **2007**(6), 025 (2007).
6. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. – Москва: Наука, 1971. – 57 с.
7. Самарский А.А. Теория разностных схем. – Москва: Наука, 1977. – 78 с.
8. D. H. Bernstein, E. Giladi and K. R. W. Jones, *Mod. Phys. Lett.* **13**, 2327 (1998).
9. R. Ruffini and S. Bonazzola, *Phys. Rev.* **187**, 1767 (1969).
10. R. Harrison, I. Moroz and K. P. Tod, *Nonlinearity*, **16**, 101 (2003).
11. Г.В. Клапдор-Клайнгротхаус, А. Штаудт, "Неускорительная физика элементарных частиц". – Москва: Наука, 1997. – 337 с.
12. С. Нараньян. "Общая астрофизика и космология". – Москва: Наука, 1995. – 657 с.
13. Bottino A. et al., 1994, *Astropart. Phys.*, 2, 67, 77.
14. Exploring the Role of Axions and Other WISPs in the Dark Universe./Ringwald. 2012 116–135. arXiv:1210.5081 [hep-ph].
15. Ultralight Particle Dark Matter/ Ringwald. 25th Rencontres de Blois on "Particle Physics and Cosmology", Blois, France, May 26-31, 2013. arXiv:1310.1256 [hep-ph].
16. Sikivie, N. Sullivan and D.B. Tanner. Axion Dark Matter Detection using an LC Circuit. arXiv:1311.0139, 2013.
17. Ian P Stern, on behalf of the ADMX and ADMX-HF collaborations. Axion Dark Matter Searches. VII International Conference on Interconnections between Particle Physics and Cosmology, Deadwood, SD, USA, 2013. arXiv:1403.5332v1, 21 Mar 2014.

18. Leslie J Rosenberg. ADMX: An Ultra-Sensitive Search for Axion Dark-Matter. UCLA Dark Matter 2014 Meeting February 27, 2014.
19. K. Barth, A. Belov, B. Beltran. CAST constraints on the axion-electron coupling. *Journal of Cosmology and Astroparticle Physics* 05 (2013) 010. Published 9 May 2013.
20. F. J. Iguaz on behalf of the CAST Collaboration. The CAST experiment: status and perspectives. *Identification of Dark Matter 2010-IDM2010* July 26-30, 2010. arXiv:1110.2116v1 [hep-ex] 10 Oct 2011.
21. Igor G. Irastorza. CERN Axion Solar Telescope (CAST). *Symposium on Detector Developments for Particle, Astroparticle and Synchrotron Radiation Experiments*. SLAC, Stanford, California, US, 6-10 April 2006.
22. Теория сплайнов и её приложения./Альберг Д., Нильсон Э., Уолш Д. – Москва: Наука, 1972. – 391 с.
23. Солитоны и нелинейные волновые уравнения/Додд Р., Эйлбек Дж., Гибсон Дж.: Пер. с англ. – М.: Мир, 1988. – 694с.
24. Численные методы на основе метода Галеркина./Флетчер К. – Москва: Мир, 1988. – 235 с.
25. Моррис Х. Солитоны и нелинейные волновые уравнения: Пер. с англ. – Москва: Мир, 1988. – 694с.
26. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). – Москва: Наука, 1989. – 768с.
27. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. II. Теория поля. – Москва: Наука, 1989. – 512с.
28. McCurdy C.W., Stroud C.K. Eliminating wavepacket reflection from grid boundaries using complex coordinate contours // *Computer Phys. Commun.* – 1991. – V. 63. – P. 323-330.
29. Методы расщепления./Марчук Г.И. – Москва: Наука, 1988. – 202 с.
30. Effective Evolution Equations from Quantum Dynamics/ N. Benedikter, M. Porta and B. Schlein, , *Springer Briefs in Mathematical Physics*, 2016, 212 с.

31. Method for Solving Parabolic Partial Differential Equations/J. Crank and P. Nicolson, *Proc. Camb. Philos.*, 1947, 632 c.
32. E. W. Mielke and J. A. V. Prerez, *Phys. Lett. B* **671**, 174 (2009).
33. H.-Y. Schive, M.-H. Liao, T.-P. Woo, S. K. Wong, T. Chiueh, T. Broadhurst and W.-Y. P. Hwang, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 261302 (2014).
34. L. Visinelli and S. Vagnozzi, *Phys. Rev. D* **99**, 063517 (2019).
35. R. Hlozek, D. Grin, D. J. E. Marsh and P. G. Ferreira, *Phys. Rev. D* **91**, 103512 (2015).
36. R. Hlozek, D. J. E. Marsh and D. Grin, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **476**, 3063 (2018).
37. Bozek, D. J. E. Marsh, J. Silk and R. F. G. Wyse, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **450**, 209 (2015).
38. H. Y. Schive, T. Chiueh, T. Broadhurst and K. W. Huang, *Astrophys. J.* **818**, 89 (2016).
39. H. Davoudiasl and P. B. Denton, *Phys. Rev. Lett.* **123**, 021102 (2019).
40. M. Richards, Convergence in the Mean-Field Limit for Two Species of Bosonic Particles, Thesis, (2014).
41. G. P. Berman, V. N. Gorshkov, V. I. Tsifrinovich, M. Merkli, and X. Wang. *Modern Physics Letters A*, **34**, 1950361 (2019).
42. Computational Physics/ Potter, J. Wiley & Sons, 1973, 352